

MTA Számítástechnikai és Automatizálási Kutató Intézet Budapest





MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADEÉMIA  
SZÁMITÁSTECHNIKAI ÉS AUTOMATIZÁLÁSI KUTATÓ INTÉZET

Tanulmányok 13/1973.

510.515

ALLEGATA CONNOMENTUM HAYOM  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
TISZTELI ÖPATTU ISKOLÁSTANOTUA EN SANIFICATCATTNASS

MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
KÖNYVTÁRA

1951.12.15. 10.00



Jedlovsky Pál

ÚJ MÓDSZER BONYOLULT REKTIFIKÁLÓ OSZLOPOK VEGYÉSZ-  
MÉRNÖKI SZÁMITÁSÁRA

Kandidátusi értekezés

Budapest, 1973.

A kiadásért felelős

Dr. Vámos Tibor

az

MTA Számítástechnikai és Automatizálási

Kutató Intézetének

igazgatója

Készült az Országos Műszaki Könyvtár és Dokumentációs Köz-  
pont házi sokszorosítójában

F.v.: Janoch Gyula

## TARTALOMJEGYZÉK

1. BEVEZETÉS	1
2. FELADAT MEGFOGALMAZÁSA	3
3. IRODALMI ÖSSZEFOGLALÁS	8
3.1. Tányérról tányérra történő számítás	9
3.2. A $\theta$ /theta/ módszer	11
3.3. Tridiagonális módszerek	18
3.4. Egyenletrendszerek szimultán megoldása	20
3.5. Egyéb számítási módszerek	24
4. A KOLONNA-SZÁMITÁS UJ MÓDSZERE	29
4.1. A módszer ismertetése	29
4.2. A feltételek elégségessége	36
4.3. A módszer konvergenciája	38
5. SZÁMITÁSTECHNIKAI KÉRDÉSEK	46
5.1. Gépidő-igény	46
5.2. A módszer módosítási lehetőségei	53
6. A PROGRAMOK ÉS AZ ELVÉGZETT SZÁMITÁSOK ISMERTETÉSE	59
6.1. Számítógépi programok	59
6.2. Az elvégzett számítások	62
7. AZ EREDMÉNYEK ÉRTÉKELESE	65
JELÖLÉSEK	70
IRODALOM	72

## MELLÉKLETEK

### Táblázatok

1. A  $k_j$  (T) függvények együtthatói
2. A kiindulási adatok
  1. rész. 1-6. feladat
  2. rész 6. feladat
3. A betáplálások összetétele
4. Egy iteráció időigénye
5. A szükséges iterációk száma
  - 1.rész 1-5. feladat
  - 2.rész 6. feladat
6. A hibák alakulása iterációnként
  1. rész 2-4. feladat, 6.1/a program
  2. rész 1. feladat, 6.1/a,b program
  3. rész 2. feladat, 6.1/b,c,d program
  4. rész 3. feladat, 6.1/b,c program
  5. rész 4. feladat, 6.1/b,e,f program
  6. rész 5. feladat, 6.1/b,c program
7. A 6. feladat eredményei. A pentán móltörtje a fejtermékben.

### Ábrák

1. Egy elméleti tányér vázlata
2. Bonyolult rektifikáló oszlop vázlata
3. A hibák alakulása a 2. feladat megoldásánál
4. A hibák alakulása a 3. feladat megoldásánál
5. A hibák alakulása a 4. feladat megoldásánál /6.1/b program/
6. A hibák alakulása a 4. feladat megoldásánál /6.1/e program/
7. Az  $E_1$  hiba alakulása a 4. feladat különböző megoldásainál
8. A pentán móltörtje a fejtermékben /6. feladat,  $D=0,2887$ /
9. A pentán móltörtje a fejtermékben /6. feladat, 18 tányér/
10. A pentán móltörtje a fejtermékben /6. feladat, 10 tányér/



## 1. BEVEZETÉS

A vegyészmérnöki tudomány alapvető feladata olyan általános törvényszerűségek felderítése, amelyek segítségével le lehet írni a vegyipari műveleti egységek működését. Benedek Pál és László Antal már 1960-ban ezt a célt tűzték a vegyészmérnöki tudomány elé \*, az azóta eltelt több mint egy évtizedben pedig a gyors működésű elektronikus számítógépek elterjedése még inkább időszerűvé és fontossá tette e törvényszerűségek matematikai formában való megfogalmazását, más szóval a vegyipari műveleti egységek matematikai modellezését.

A kémiai reakciók megvalósítására szolgáló reaktorok mellett a legjellegzetesebb vegyipari műveleti egységek az egyensúlyi elválasztó egységek /abszorber, extraktor, stb./, ezeknek egyik legelterjedtebb képviselője a rektifikáló oszlop, köznapin néven kolonna. Sajnálatos, hogy több komponensű elegyek rektifikálásának matematikai modellezése - amely a vegyészmérnöki tudomány alapvető kérdése - mindmáig nincs kellően kidolgozva. Munkámmal e kérdés tisztázásához szeretnék hozzájárulni.

A feladat összetett, és több oldalról megközelíthető. Véleményem szerint azonban a kérdés tárgyalása csak akkor lehet eredményes, ha dialektikus egységbe ötvöztük a vegyészmérnöki, matematikusi és számítástechnikai felfogást. Célunk egy mérnöki feladat megoldása a gyakorlati életben megkívánt pontossággal. Az általánosság tudományos igénye miatt matematikai szabotosságra törekszünk, és mindvégig szem előtt tartjuk a számítástechnika szempontjait: az egyszerűséget, célszerűséget és a számítások gyors elvégezhetőségét.

---

\* Megítélésünk szerint mérnök az, aki ismeretek, méretek és mértékegységek birtokában méretezni tud. [MKL. 15. No.7. 315. (1960) ].

A vegyészmérnöki szemlélet azt követeli, hogy ne csak felirjuk a megfelelő egyenleteket, hanem megoldási módszert is adjunk, sőt meg is oldjuk azokat. Ezért majdnem valamennyi kidolgozott algoritmus számítógépi programját elkészítettük, ezek segítségével megoldottunk több mintafeladatot és elemeztük az eközben szerzett tapasztalatokat.

Amennyire lehetett, igyekeztem matematikailag egyszerűen foglalmazni, előnyben részesítve - a matematikában kevésbé jártas vegyészmérnökök számára - a közérthetőséget, az öncélúvá válható formalizmussal szemben.



## 2. A FELADAT MEGFOGALMAZÁSA

Rektifikáló oszlopok matematikai modellezésén olyan algoritmus kidolgozását értjük, amelynek segítségével - a szabadsági foknak megfelelő számú változó rögzítése után - ki tudjuk számítani oszlop működésére jellemző összes többi mennyiséget. Ismeretes, hogy a kondenzátorral és visszaforralóval ellátott egyszerű rektifikáló oszlop szabadsági foka - rögzített geometriai viszonyok és  $m$  komponensű betáplálás esetén -  $m+4$ . Ennek terhére rögzítjük a betáplálás tulajdonságait egyértelműen leíró  $m+2$  változót: az anyagáramot, a hőmérsékletet /ezzel egyenértékű lehet az entalpia vagy a gőz-folyadék arány/, a nyomást és az összetételt, továbbá a fejtermék és fejreflux mennyiségét. Bonyolult kolonnánál minden oldalelvétel egy, minden újabb betáplálás  $/m+2/$  további szabadsági fokot jelent, amelyek terhére az oldalelvétel mennyiségét, illetve a betáplálás mennyiségét és állapotát tekintjük ismertnek.

Nem tartozik a tárgyalás lényegéhez, csupán egyszerűség kedvéért, a nyomást rögzítettnek és az egész oszlopban azonosnak tekintjük és elhanyagoljuk a hőveszteségeket is. A kidolgozott algoritmus - ha erre az adott feladatnál szükség van - csekély módosítással alkalmas a nyomáskereső és hőveszteség figyelembevételével történő számításra is.

Ezzel szemben a tárgyalás lényegéhez tartozik, hogy elméleti tényezőket tételezünk fel, vagyis úgy számolunk, hogy az egyes tényezőket elhagyó folyadék- és gőzáram egymással fázisegyensúlyban van.

Feladatunkat tehát szavakban a következőképpen fogalmazhatjuk meg: rögzített betáplálás és mennyiségi viszonyok mellett keressük az egyes tányérokat - és így az oszlopot - elhagyó anyagáramok mennyiségét, hőmérsékletét és összetételét, megkivánva, hogy minden tányéron teljesüljenek a komponens- és hőmérleg-egyenletek, valamint a fázisegyensúly feltételei.

A feladat matematikai megfogalmazásához szükség van még néhány alapfeltevésre. A fázisegyensúly feltétele azt jelenti, hogy a hőmérséklet, a nyomás és az egyes komponensek kémiai potenciálja az egyes tányérokat elhagyó folyadék- és gőzfázisban azonos.

Ez utóbbit az összetételek közötti

$$y_{i,j} = \phi (T_i, P, x_{i,1}, \dots, x_{i,m}) \quad /2.1./$$

függvénykapcsolattal szokás kifejezni.

/Itt is, és a továbbiakban is - ha más megkötelést nem teszünk -  $i=1,2,\dots,n$ ,  $j=1,2,\dots,m$ , vagyis az egyenlet minden tányérra és minden komponensre vonatkozik./

Tárgyalásunkat ideális elegyekre korlátozzuk. /Egészen pontosan: az elegyedést tekintjük ideálisnak./



Ez súlyos megszorítást jelent, mégis meg kell tennünk, mert véleményünk szerint így jutunk el az alapkérdéshez, amelynek tisztázása elengedhetetlen reális elegyek elválasztásának számításához is. Matematikailag ez azt jelenti, hogy az  $y_{i,j}$  móltört csak a nyomástól, a hőmérséklettől és az  $x_{i,j}$  móltörttől függ, mégpedig az utóbbival arányos. Miután a nyomást rögzítettük, a fázisegyensúly feltételének matematikai alakja így:

$$y_{i,j} = k_j (T_i) x_{i,j} \quad /2.2/$$

Ami a  $k(T)$  függvény alakját illeti, ideális folyadék- és gőzfázis esetén a Dalton- és Henry-törvények alapján  $k(T) = p^0(T)/P$  adódik, ahol  $p^0(T)$  jelenti az illető komponens gőznyomást, ha az a folyadékfázisban egyedül van jelen. Tiszta anyagok gőznyomását a hőmérséklet függvényében az Antoine-egyenlettel írhatjuk le:

$$\ln p^0 = a + \frac{b}{T + c}, \quad /2.3/$$

ahol  $a$ ,  $b$  és  $c$  az illető anyagra jellemző állandók.

Ezt a függvényalakot nem ideális esetben is megtartjuk közelítő formulaként, úgy, hogy együtthatóit szakaszonként, kísérleti vagy irodalmi adatokból, regresszióval kell meghatározni. /Egyszerűség kedvéért a továbbiakban feltételezzük, hogy  $c = 273,16/$ . Így a /2.2/ összefüggés a következő alakot ölti:

$$y_{i,j} = \exp \left( k_j^{(1)} + k_j^{(2)} / T_{\text{abs}} \right) x_{i,j} \quad /2.4/$$

Az egyes komponensek parciális moláris entalpiáját a hőmérséklet függvényében mind folyadék-, mind gőzfázisban lineárisan közelítjük. E közelítő függvényeket mérnöki szempontból egy-egy feladathoz elegendően pontosnak, számítástechnikai szempontból pedig - egyszerűségük miatt - rendkívül célszerűnek tartjuk.

A kolonna vázlatát az 1. ábra, míg egy általános tányér vázlatát a 2. ábra mutatja. Az ezeken látható jelölésekkel feladatunkat matematikai alakban a következőképpen fogalmazhatjuk meg:

Rögzített  $F_i$ ,  $T_{B,i}$ ,  $Z_{i,j}$ ,  $L_i$ ,  $U_i$  és  $W_i$  mellett kiszámítandók az  $L_i$ ,  $V_i$ ,  $T_i$  és  $x_{i,j}$  értékek. A következő egyenletek teljesülését kívánjuk meg:

a, anyagmérleg /tömegmérleg/ egyenletek

$$L_{i-1} + V_{i+1} + F_i - L_i - V_i - U_i - W_i = 0 \quad /2.5/$$

b, komponensmérleg egyenletek

$$L_{i-1} x_{i-1,j} - (L_i + U_i) x_{i,j} - (V_i + W_i) y_{i,j} + \\ + V_{i+1} y_{i+1,j} = -F_i z_{i,j} \quad /2.6/$$

c, hőmérleg egyenletek

$$L_{i-1} H_{L,i-1} - (L_i + U_i) H_{L,i} - (V_i + W_i) H_{V,i} + \\ + V_{i+1} H_{V,i+1} = - F_i H_{B,i}, \quad /2.7/$$

ahol

$$H_{L,i} = \sum_j h_{L,j} (T_i) x_{i,j}$$

$$H_{V,i} = \sum_j h_{V,j} (T_i) y_{i,j} \quad \text{és}$$

$$H_{B,i} = (1 - v_i) \sum_j h_{L,j} (T_{B,i}) z_{L,i,j} \\ + v_i \sum_j h_{V,j} (T_{B,i}) z_{V,i,j}$$

d, a fázisegyensúly feltételei

$$y_{i,j} = k_j (T_i) x_{i,j} \quad /2.8/$$

e, a móltörtek összegére vonatkozó egyenletek

$$\sum_j x_{i,j} = 1 \quad \text{és} \quad \sum_j y_{i,j} = 1 \quad /2.9/$$



### 3. IRODALMI ÖSSZEFOGLALÁS

Az előző pontban megfogalmazott feladat megoldásával az utóbbi másfél évtizedben kezdtek intenzíven foglalkozni. Ez érthető is, hiszen ha azt a kettős célt tűzzük magunk elé, hogy:

- valóságos méretű feladatot /és nem tankönyvi mintapéldát/
- a mérnöki gyakorlatban megengedhető időráfordítással

oldunk meg, akkor a számítógép nélkülözhetetlen segédeszközzé válik. Az elektronikus számítógép pedig a műszaki életben az ötvenes évek végén kezdett megjeleni. Így a számítógép előtti korszakot tulajdonképpen két cikk jelenti: [20] , [32] , amelyek azonban a maguk idejében inkább elméletileg levezetett egyenletek voltak, mint a gyakorlatban használható számítási módszerek. Az első, számítógépre alapozott munkák 1958-1959-ben jelentek meg: [1] , [12] , [22] , [28] , és mindjárt négy különböző irányzat kiindulópontjává váltak. A probléma az irodalomban azóta is állandóan napirenden van, ami egyrészt a kérdés fontosságára és - minden egyszerűsítő feltevés ellenére - bonyolult voltára, másrészt arra utal, hogy mindmáig nem sikerült a feladatot minden szempontból kielégítően megoldani.

Mielőtt az irodalom részletes ismertetésére rátérnénk, két általános kritikai szempontot szeretnék megemlíteni.



Tulajdonképpen két, egymással ellentétes veszélyről van szó. Az egyik a matematikai formalizmusba való tulzott elmerülés, amelynek eredményeként szép, de gyakorlatban nem vagy alig használható egyenleteket kapunk.

A másik - ezzel ellentétes - veszély a szűk prakticista szemlélet, a matematikailag nem kellően megalapozott, intuitív, ad hoc módszerek használata.

Az irodalom tárgyalását időrend helyett a feladat különböző megközelítései szerint csoportosítjuk.

### 3.1. Tányérról tányérra történő számítás

A kérdés legegyszerűbb és legszemléletesebb megközelítése a következő: tételezzük fel, hogy ismerjük az  $i+1$ -edik tányérról felszálló gőz és az  $i$ -edik tányérról lecsurgó folyadék állapotát. Ezen adatokból kiszámítható

- az egyensúlyi egyenletek alapján az  $i$ -edik tányérról felszálló gőz összetétele,
- a gőz mennyiségét feltételezve az anyagmérlegegyenletekből az  $i-1$ -edik tányérról lecsurgó folyadék mennyisége és összetétele,
- a buborékpont-egyenletből az  $i-1$ -edik tányér hőmérséklete,
- a hőmérleg alapján iteratív uton kiszámítható a gőzmennyiség helyes értéke.

Ezzel az  $i-1$ -edik tényér szempontjából ugyan-  
az a szituáció áll fenn, mint a számítás megkezdése-  
kor az  $i$ -edik tényérra, így a számításmenet tényérről  
tényérra felfelé folytatható. Hasonló eljárás alkal-  
mazható lefelé is, így egyszerű kolonnára az egész  
oszlop számítása a következőképpen szervezhető meg:

- feltételezünk egy fejtermék összetételt, és  
elindítjuk a számítást felülről lefelé,
- a globális anyagmérleg alapján kiszámítjuk a  
fenéktermék összetételét, és tényérről tá-  
nyérra felfelé haladunk,
- valahol a kolonna közepén - célszerűen a be-  
táplálásnál - a két számítás találkozik és  
itt ki kell elégíteniünk bizonyos kapcsolódá-  
si feltételeket,
- e kapcsolódási feltételek alapján korrigáljuk  
a feltételezett fejtermék összetételt.

Ez a lényege J. Greenstadt és munkatársai  
1958-ban megjelent cikkében ismertetett módszernek  
[12], amely azonban nem talált követőkre, és lénye-  
gében zsákutcat jelentett. Ennek több oka van:  
először is az utolsó pontban említett korrekció tu-  
lajdonképpen egy

$$F_j (x_{1,1}, x_{1,2}, \dots, x_{1,m}) = 0 \quad /3.1/$$

alaku  $m$  változós nem-lineáris egyenletrendszer megoldását jelenti, ahol az egyes  $F_j$  függvények kiszámítása alkotja az egész kolonna-számítást. A Newton-módszerhez szükséges parciális deriváltak kiszámítása már a szerzőknek is nagy nehézségeket jelentett, a véges differenciákkal való közelítés pedig az egész kolonna  $m+1$ -szeri végigszámítását jelentené egyetlen lépéshez. Ráadásul a függvények erősen nem-lineárisak, tehát gyors konvergencia sem várható. A másik, talán még súlyosabb nehézség, hogy a módszer a fejtermék összetételének előzetes ismeretét kívánja meg. Jó becslést adni - különösen azokra a komponensekre, amelyek a fejtermékben gyakorlatilag egyáltalában nem fordulnak elő, és amelyekre a számítás pl.  $10^{-5}$ - $10^{-20}$  értéket eredményezne - szinte lehetetlen, márpedig a számítás éppen erre rendkívül érzékeny.

### 3.2. A\_0 /theta/ módszer

W.N. Lyster és munkatársai 1959-ben több cikkből álló sorozatot tettek közzé [22] - [24], amelyben új módszert javasoltak rektifikáló oszlopok számítására. Lényege, hogy az oszlop végigszámolása után az egyes komponenseknek a fej- és fenéktermék közötti megoszlását a

$$\left( \frac{b_j}{d_j} \right)_{\text{kor}} = 0 \left( \frac{b_j}{d_j} \right)_{\text{szám}} \quad /3.2/$$



egyenlet alapján korrigálták. A szerzők az anyagmérleg-egyenleteket - az e dolgozatban alkalmazott koncepciótól formailag eltérően - komponensáramokra irták fel, így e gondolatmenetben  $b_j$ ,  $d_j$ ,  $f_j$ ,  $\ell_{i,j}$  ill.  $v_{i,j}$  a  $j$ -edik komponens áramát jelenti rendre a fenéktermékben, desztillátumban, betáplálásban, az  $i$ -edik tányérról lecsurgó folyadékban, illetve az onnan felszálló gőzben. A  $\theta$  korrekciós tényezőt valamennyi komponensre azonosnak tekintették. Ez valóban zseniális gondolatnak bizonyult, mert kiküszöbölte az előbb említett sokváltozós egyenletrendszert és a parciális deriváltak szükségességét. E helyett minden iterációban egy-változós függvény zérushelyét kell megkeresni. A komponensmérleg egyenlet egyszerű oszlopra felírva

$$d_{j,\text{kor}} + b_{j,\text{kor}} = f_j \quad /3.3/$$

amiből

$$d_{j,\text{kor}} = \frac{f_j}{1 + \left( \frac{b_j}{d_j} \right)_{\text{kor}}} \quad /3.4/$$

vagy a /3.2/-t behelyettesítve:

$$d_{j,\text{kor}} = \frac{f_j}{1 + \theta \left( \frac{b_j}{d_j} \right)_{\text{szám}}} \quad /3.5/$$

Mivel a komponensáramok összegének ki kell adnia a teljes desztillátum mennyiségét,  $\theta$  meghatározásához a

$$g(\theta) = \frac{f_j}{1 + \theta \left( \frac{b_j}{d_j} \right)} - D \quad /3.6/$$

szám

függvény zérushelyét kell megkeresni. Ez aránylag könnyű feladat, mert a  $g(\theta)$  függvény a  $(0, +\infty)$  intervallumban szigorúan monoton csökkenő,  $g(0) = B$  és  $g(\infty) = -D$ , így ebben az intervallumban pontosan egy gyöke van.

Feltevődik természetesen a kérdés, hogy van-e valami elméleti alapja a  $\theta$  korrekciós tényezőnek? Bár sok kísérlet történt a módszer elméleti megalapozására és értelmezésére, mégis úgy gondoljuk, hogy az igazsághoz a szerzők legelső megállapítása áll a legközelebb: "a feladat empirikus összefüggés keresése volt a számított és korrigált  $b_i/d_i$  értékek között". Így a módszert matematikai szempontból intuitívnek kell tekinteni, használhatóságát azonban több száz eset tapasztalata igazolja.

A komponensmérleg számítás - abszorpció és sztrippelési tényezők bevezetésével - úgy van szervezve, hogy az egyes komponensek móltörtjére explicit módon ne legyen szükség.

A számítás menete a következő:

- A kolonna hőmérsékletprofiljának felvétele,
- A folyadék- és gőzáramok felvétele,
- A komponensmérleg számítás elvégzése az oszlop két végéről elindítva,

- Az oszlop közepén kapott  $b_j/d_j$  elválasztási tényező korrekciója a  $\theta$  módszerrel,
- A korrigált  $b_j/d_j$  értékek és a globális anyagmérleg alapján  $b_j$  és  $d_j$  számítása,
- A komponensmérleg egyenletekből adódó  $v_{i,j}/d_j$ , illetve  $\lambda_{i,j}/b_j$  értékek alapján az összetétel kiszámítása minden tényéron.
- A hőmérsékletprofil korrigálása a buborék-, illetve harmatpontok, a folyadék- és gőzáramprofilé a hőmérleg alapján,
- Az egész számítás megismétlése az új hőmérséklet-, illetve folyadék- és gőzáramprofil alapján számított abszorpciós és sztrippelési tényezőkkel.

A számítás akkor fejeződik be, ha a  $g(\theta)$  függvény zérushelye - az előírt hibahatáron belül - a  $\theta = 1$  értéknél van. Ekkor ugyanis a számított és korrigált elválasztási tényező azonos, és az egyuttal valamennyi egyenlet kielégítését is jelenti.

Bár a számításmenet merőben különbözőnek látszik a 3.1. pontban ismerttetethez képest, kis átalakítása után a rokonság nyilvánvalóvá válik.

A módszer általánosítását több betáplálást és több elvételt tartalmazó, bonyolult kolonnák számítására a szerzők a sorozat harmadik cikkében írták le.



Eszerint minden oldalelvételhez egy újabb  $\theta_p$  korrekciós tényezőt rendeltek hozzá, a

$$\left( \frac{w_{p,j}}{d_j} \right)_{\text{kor}} = \theta_p \left( \frac{w_{p,j}}{d_j} \right)_{\text{szám}} \quad /3.7/$$

összefüggés alapján. A korrigált desztillátum mennyiség a

$$d_{j,\text{kor}} = \frac{f_j}{1 + \theta_0 \left( \frac{b_j}{d_j} \right)_{\text{szám}} + \theta_1 \left( \frac{w_{1,j}}{d_j} \right)_{\text{szám}} + \dots + \theta_p \left( \frac{w_{p,j}}{d_j} \right)_{\text{szám}}} \quad /3.8/$$

összefüggéssel számítható /ahol  $\theta_0$  jelenti az egyszerű oszlop  $\theta$ -ját/.

A korrekció alapjául szolgáló függvények

$$g_0(\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_p) = \sum_j d_{j,\text{kor}} - D$$

$$g_p(\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_p) = \sum_j \left[ \theta_p \left( \frac{w_{p,j}}{d_j} \right)_{\text{szám}} d_{j,\text{kor}} \right] - w_p \quad /3.9/$$

alakban írhatók. A  $\theta$ -kat /3.9/-ből például Newton-iterációval lehet kiszámítani.

A módszer széles körben elterjedt, amiben nem kis része volt C.D. Holland - a cikksorozat egyik társszerzője - kitűnő könyvének [13], ugyanakkor, különösen bonyolult oszlopok számításánál, sok bírálat is érte. A bírálók elsősorban a numerikus - kerekítési - hibák iránti érzékenységet tették szóvá, véleményünk szerint azonban a számítások sikertelenségének mélyebb oka is van. Mint említettük, a komponensmérleg számítások igen érzékenyek az induló értékekre. Ha az oszlopba több helyen történik betáplálás, akkor a két végéről megindított és valamely betáplálásnál befejezett komponensmérleg számításoknak át kell haladniuk egy olyan tényéron, ahol szintén betáplálás van. Ha most az indulásnál valamelyik komponensáramot - az iteráció közelítő jellege miatt - túl kicsinek választottuk, előfordulhat, hogy e betáplálási tényerről a folyadék- és gőzárammal távozó komponens számított mennyisége kisebb lesz, mint a betáplálással odaérkező - és természetesen rögzített - mennyiség. Ez az eggyel alatta fekvő tényerről felszálló gőzban negatív komponensáramot eredményez, ami nemcsak fizikailag irreális, hanem a további számításokban is beláthatatlan következményekre vezet.

A  $\theta$  módszert veszi védelmébe D.S. Billingsley - ugyancsak az eredeti cikksorozat társszerzőinek egyike - 1966-ban megjelent cikkében [4]. Kitér a numerikus instabilitásra és a megoldás konvergenciájára. Az előbbire vonatkozóan azt állítja, hogy a komponensmérlegek számítása közben nem lépnek fel nagy kerekítési hibát okozó kivonások.



A szerző 1970-ben megjelent cikkével [5] kapcsolatban mindenekelőtt érdekes megfigyelni a két cikk közötti rendkívül nagy szemléleti különbséget. Ez utóbbiban - igaz, hogy még mindig komponensáramokra és nem móltörtekre felírva - már lényegében a tridiagonális módszer kerül alkalmazásra. Tulajdonképpen helyesen látja meg a hőmérséklet korrigálásának módját is, azonban alkalmazását csak a számítás végén,  $|\theta_0 - 1| < 0.01$  esetben javasolja.

G.W. Boynton szintén 1970-ben megjelent cikkében [7] a hőmérséklet-korrekcióra  $\partial L_i / \partial T_p$  ( $p=1,2,\dots,n$ ) a  $Q_i$  hőmérleg kiegyenlítetlenség korrekciójára a  $\partial Q_i / \partial L_p$  parciális deriváltak alkalmazását javasolja. A cikk azonban inkább egyenletek felírását nyújtja, és nem ad jól alkalmazható számítási módszert. Ráadásul itt mutatkozik meg az a szemléleti probléma, amit a komponensmérlegeknek áramokra és nem móltörtekre való felírása okoz. Ez teszi ugyanis szükségessé az egymásba ágyazott - és ezért rendkívül munkaigényes - iterációk alkalmazását.

A két szerző, D.S. Billingsley és G.W. Boynton közös cikke [6] lényegében a [7] -ben elindított gondolatmenet folytatása, és teljes szakítást jelent a  $\theta$  módszerrel.

A  $\theta$  módszert sokan átvették, alkalmazták, javították [11], [29], és például erre alapozva dolgozott ki programrendszert a Chemoprojekt csehszlovák vegyipari tervezőiroda is. Mint azt Z. Lutovski az

1972. évi CHISA kongresszuson tartott előadásában [21] elmondta, a problémáknak mintegy 90 %-ával tudtak sikerrel megbirkózni. Ezért több betáplálás esetére igen bonyolult korrekciós formulát dolgoztak ki. Ez gyakorlati szempontból nézve, figyelembe véve a programrendszer kifejlesztésére már ráfordított nagy munkát és a sikeres számítások magas arányát, indokolt lehet, elméleti, tudományos szempontból azonban inkább arra utal, hogy a problémákat gyökerestől csak egy teljesen más módszer alkalmazásával lehet megoldani.

### 3.3. Tridiagonális mátrix módszerek

A bevezetőben említett négy korai és egymástól független irányzatot képviselő cikk egyike N.R. Amundson és A.J. Pontinen 1958-ban megjelent munkája [1], amely az ún. tridiagonális mátrix módszerek alapját fektette le. A szerzők a számítógépek vegyipari alkalmazásának e korai szakaszában rendkívül világosan foglalmazták meg a problémát, és matematikailag helyesen, rendszerezve és áttekinthetően írják fel a kielégítendő egyenleteket. Mégis a szerzőknek egy egy évvel későbbi publikációján kívül [2], amely a számítási eljárást a kolonnához kapcsolt sztripper esetére terjeszti ki, a legközelebbi, e módszert alkalmazó és továbbfejlesztő munka csak 1966-ban jelent meg [37]. Azóta e cikk vált a tridiagonális módszer legfontosabb irodalmi forrásává.



Az alapvető egyenleteket a feladat matematikai megfogalmazásánál már az itt szükséges formában irtuk fel /2.5 - 2.9/. Ezek megismétlésétől eltekintünk. A komponensmérleg egyenleteket - komponensenként külön-külön - könnyen meg lehet oldani, ha figyelembe vesszük az egyenletrendszer mátrixának speciális, tridiagonális szerkezetét. /lásd 4.1. pont/

A kapott  $x_{i,j}$  értékeket a fázisegyensúlyi egyenletekbe helyettesítve új hőmérsékletprofil, míg a hőmérleg egyenletekből új folyadék- és gőzáramprofil számítunk. A szerzők nem említik ugyan a kapott  $x_{i,j}$  értékek normálását, ez azonban természetes lépésként adódik már [1] -ben is. A  $k$  egyensúlyi állandók hőmérsékletfüggését negyedfoku polinommal veszik számításba és a /2.8/ egyenletből az új  $T_1$  kiszámítására biztonsági okokból a Müller-módszert használják a Newton-iteráció helyett. Véleményünk szerint, ha a  $k(T)$  függvényt a /2.4/ alakban közelítjük, ez felesleges /lásd 4.2. pont/.

Az eljárás konvergenciája különösen a megoldás közelében nem kellően gyors. Ezen kíván segíteni D.K. Houtby és A.U. Khan [14] intuitív konvergenciagyorsító eljárása. A módszer lényege, hogy három iteráció után az egyes tányérok hőmérsékletét a /2.9/ egyenletek megoldása helyett a várható végső hőmérsékletprofil előrebecslésével korrigálják.

Valószínű, hogy a módszer az esetek többségében valóban gyorsabb konvergenciát ad, erre azonban

éppen az intuitív jelleg és a matematikai megalapozottság hiánya miatt nincs biztosíték. Az eljárás elvi hibája ugyanabban rejlik, amiben az eredeti Wang-Henke módszeré, azt tételezi fel, hogy minden  $S_i$  függvény csak az illető tányér  $T_i$  hőmérsékletétől függ. Az igazság viszont az, hogy minden  $S_i$  függvény valamennyi tányér hőmérsékletének függvénye.

### 3.4. Egyenletrendszerek szimultán megoldása

Több kísérlet történt a /2.5 - 2.9/ egyenletek szimultán felírására és megoldására. J.S. Newman [25] a folyadékáram profilt korrigálja a hőmérséklet függvényében a

$$dL_i = \frac{\partial L_i}{\partial T_1} dT_1 + \frac{\partial L_i}{\partial T_2} dT_2 + \dots + \frac{\partial L_i}{\partial T_n} dT_n \quad /3.10/$$

formában. A hőmérséklet-korrekciókra lineáris egyenletrendszert kap, amelynek együtthatóit azonban csak nagyon bonyolult iteratív uton tudja kiszámítani. A kapott eredmények összehasonlításából kitűnik, hogy a szükséges iterációk száma valamivel kisebb, mint az egyéb módszereknél, és a szerző egy más módszerekkel nem kezelhető feladatot is sikeresen oldott meg.

Az idézett munka fontos szempontokat vet fel a különböző módszerek összehasonlítására. Megállapítása szerint - és ezzel egyet kell érteni - egymagában az iterációk számának összehasonlítása nem megfelelő



értékelési alap. Figyelembe kell venni a megbízhatóságot, a számítás időszükségletét és az elérhető pontosságot.

A feladat teljesen általánosan matematikai kezelésére törekedett F.P. Stainthorp és P.A. Whitehouse [30], akik végül is - egyszerű kolonnákra -  $n(2m+4)$  ismeretlenes, nem-lineáris egyenletrendszerhez jutottak. A megoldásra Newton-iterációt javasolnak, az ehhez szükséges parciális deriváltak azonban csak közelítőleg lehet számítani. Bár az ezen elven dolgozó számítógépi program ismertetésekor [31] egyszerű kolonnákra a speciális tulajdonságok kihasználása végül is csak  $2n$  ismeretlenes egyenletrendszer megoldását igényli, a munkát inkább érdekes és általánosságra törekvő matematikai levezetésnek, mint a gyakorlatban használható számítási eljárásnak kell tekinteni.

Ugyanezt az utat követi J.W. Tierny és J.A. Bruno [33], illetve J.W. Tierny és J.L. Yanosik [34], akik a feladatot teljesen általánosan, mátrix-egyenletek formájában írják fel. Végül is  $2n$  ismeretlenes lineáris egyenletrendszerhez jutnak, amelynek együtthatóit bonyolult mátrix-szorzásokkal lehet kiszámítani. Így, bár a mintafeladatokban igen gyors konvergenciát értek el, ebben a formában a módszer valószínűleg tulságosan munkaigényes, és az elég bonyolult megfogalmazás miatt sem számíthat széleskörű elterjedésre. Ami a szükséges memóriakapacitást illeti, 32K-szó gyorsmemóriával háttérmemória igénybevétele nélkül [33] szerint mintegy 50 tányéros, a [34] szerint

10 komponenst és 25 tényért tartalmazó feladatot tudtak kezelni. A második cikkben összehasonlítják az Amundson [1] által közölt mintafeladatra kapott eredményeiket az eredeti és a Wang-Henke-módszer szerint kapottakkal. Bár kevesebb iterációra van szükségük, és a konvergencia a megoldás közelében négyzetes, egy-egy iteráció munkaigénye valószínűleg sokkal nagyobb, és ezért kétséges, hogy a számítás teljes időszükségletében elérhető-e megtakarítás.

J.F. Tomich egy 1970-ben megjelent cikkében [35] szintén a tridiagonális módszert alkalmazza az anyagmérleg egyenletek felírására és megoldására. A hőmérséklet- és gőzáramprofilt szimultán korrigálja, a megfelelő egyenleteket hibafüggvény formában írva fel:

$$S_i = \sum_j Y_{i,j} - \sum_j x_{i,j} \quad /3.11/$$

illetve

$$E_i = V_{i+1} H_{V,i+1} + L_{i-1} H_{L,i-1} - (L_i + V_i) H_{L,i} - (V_i + W_i) H_{V,i} + F_i H_{B,i} + Q_i \quad /3.12/$$

Az  $S_i$  és  $E_i$  függvényeket  $T_i$  és  $V_i$  szerint sorbafejtve, a lineáris tagok után megállva, a kifejezést zérussal egyenlővé téve



$$0 = S_i + \sum_p \frac{\partial S_i}{\partial V_p} \Delta V_p + \sum_p \frac{\partial S_i}{\partial T_p} \Delta T_p \quad /3.13/$$

$$0 = E_i + \sum_p \frac{\partial E_i}{\partial V_p} \Delta V_p + \sum_p \frac{\partial E_i}{\partial T_p} \Delta T_p$$

a kívánt korrekciókra szintén  $2n$  ismeretlenes lineáris egyenletrendszer adódik. A korrekciós egyenlet együtthatóit a szerző a véges differenciák módszerével határozza meg. Ez azonban az  $S_i$  és  $E_i$  értékeknek  $(2n+1)$  -szer való kiszámítását igényli, vagyis egy Tomich-féle iteráció munkaigénye közelítőleg  $2n+1$  Wang-Henke-féle iterációnak felel meg, a korrekciós egyenlet mátrixának felírásáig. Ehhez járul a megoldás  $n^3$ -al arányos munkaideje. A három mintafeladat megoldásához szükséges iterációk száma /8,11, illetve 11/ nem utal gyors konvergenciára. Mindent egybevéve, Tomich módszerét nem lehet versenyképesnek tartani.

J.W. Gentry [10] szintén linearizálja a globális anyagmérleg, a komponens és hőmérleg, valamint az egyensúlyi egyenleteket. Részletesen elemzi saját módszerének időszükségletét, összehasonlítva az Amundson-Pontinen-féleével. /Az összehasonlítás valójában a Wang-Henke-módszerrel történik./ A következtetés nem egyértelmű, egyik helyen a szerző azt állítja, hogy módszere  $(0.75 m^2 + 3.5m + 5)$  -ször munkaigényesebb, más helyen, hogy munkaigénye nem éri el az Amundson-Pontinen-féle módszer  $m$ -szeresét. Még a második, számára kedvezőbbet tekintve és figyelembe véve azt is, hogy ugyanannak az 5 komponensű



elegyre vonatkozó munkafeladatnak a megoldása, amelyhez Amundsonnak 15, Wang és Henkének 6 iterációra volt szüksége, nála 10 iterációt igényelt, arra a következtetésre kell jutnunk, hogy e módszer semmi-képpen nem jelent előrelépést a már ismertekhez képest.

O. Orbach és munkatársai [27] ugyancsak Newton-Raphson-iterációval korrigálják a hőmérsékletprofilt, a Jacobi-mátrixot azonban nem minden iterációban ujitják fel. A szükséges iterációk száma így nagyon magas, 30-50 lesz. A Jacobi-mátrix inverzének módosítására Brusset [8] a Broyden módszert ajánlja.

### 3.5. Egyéb számítási módszerek

Az irodalomban még két, az eddigiektől teljesen eltérő számítási módszert dolgoztak ki rektifikáló oszlopok matematikai modellezésére. Az első, a tranziens mérlegegyenletek idő szerinti integrálásán alapszik, mintegy szimulálva a stacioner állapot beállítását. A módszert először 1958-ban A. Rose [28] javasolta, majd W.E. Ball [3] javított az integrálás módszerén, végül J. Jelinek, V. Hlaváček és M. Kubiček dolgoztak ki hatékony számítási módszert [16], [17], és vizsgálták a konvergencia gyorsaságát [15]

Egyszerű kolonnára a tranziens komponensmérleg egyenlet a következő:

$$L_{i-1}x_{i-1,j} - V_{i,j}y_{i,j} - L_{i,j}x_{i,j} + V_{i+1,j}y_{i+1,j} =$$

$$= z_j \frac{dx_{i,j}}{d\tau} \quad /3.14/$$

ahol  $z_j$  a tányéron lévő folyadékfázis mennyisége és  $\tau$  az idő. Az integrálást implicit Euler-módszerrel végzik, vagyis

$$\frac{dx_{i,j}}{d\tau} = \beta \left( \frac{dx_{i,j}}{d\tau} \right)^{(t+1)} + (1-\beta) \left( \frac{dx_{i,j}}{d\tau} \right)^{(t)} \quad /3.15/$$

ahol  $0 < \beta \leq 1$ .

Ebbe az egyenletbe  $\beta = 1$ -et behelyettesítve, az integrálás mindig stabil és a /3.14/ egyenletbe a fázisegyensúlyi feltételeket beírva a következő egyenletet kapjuk:

$$- \frac{\Delta\tau L_{i-1}}{z_{i-1}} x_{i-1,j} + \left( \frac{\Delta\tau (V_{i,j} k_{i,j} + L_{i,j})}{z_{i,j}} + 1 \right) x_{i,j} -$$

$$- \frac{\Delta\tau V_{i+1,j} k_{i+1,j}}{z_{i+1,j}} x_{i+1,j} = x_{i,j}^{(t-1)} \quad /3.16/$$

ahol a baloldalon az  $L$ ,  $V$ ,  $k$  és  $x$  értékeket a  $(t)$  időpontban kell venni. Ha az ismeretlen  $(t)$  időpontbeli  $L$ ,  $V$  és  $k$  értékek helyébe azok  $(t-1)$  időpontbeli értékét helyettesítjük, megoldhatóvá tettük az egyenletrendszert, de valamelyest tovább rontottuk az amúgy is csak lineáris konvergenciát. A konvergencia sebessége

alapvetően az  $\omega = \Delta\tau/Z$  relaxációs faktor megválasztásától függ. A szerzők a  $10 \leq \omega \leq 1000$  tartományt vizsgálták, és különböző konvergenciagyorsító eljárásokat próbáltak ki. Végeredményben egy hat komponensű elegy elválasztása nyolc tényéron mintegy 20-50 iterációt igényelt. Mivel a /3.14/ egyenlet a fenti helyettesítéssel ugyanolyan tridiagonális egyenletrendszerre válik, mint a /4.3/, ezért egy iteráció munkaigénye körülbelül megfelel egy Wang-Henke-iterációénak. A szerzők módszerük előnyét elsősorban a megbízhatóságban és több kolonnából álló összetett rendszerek könnyű kezelhetőségében látják. Ezeket ismerve is, meg kell azonban állapítani, hogy a módszer lassu.

A másik -az eddigiektől teljesen eltérő- módszer az invariáns beágyazás elvén épül fel. Ez kétoldali peremértékfeladatok megoldására kidolgozott, nagymértékben intuitív módszer, mellyel azonban diszkrét problémák is tárgyalhatók. Lee és Noh [18] , [19] , [26] cikksorozatban mutatták meg e matematikai eljárás alkalmazhatóságát rektifikáló oszlopok modellezésére. Anélkül, hogy a matematikai részletek tárgyalásába belemennénk, úgy véljük, hogy a matematikai tárgyalás bonyolultsága, nagy memória- és munkaigénye miatt az eljárást inkább úgy kell tekintenünk, mint egy matematikai módszernek a vegyészmérnöki problémakörből vett illusztrációját, s nem mint egy vegyészmérnöki feladatnak a gyakorlatban is használható megoldását.



Végül két olyan cikket tartok szükségesnek még említeni, amelyek - minthogy nem új eljárást, hanem a problémakörre vonatkozó általános gondolatokat tartalmaznak - a mi csoportosításunkba nem voltak beleilleszthetők. J.R. Friday és B.D. Smith

[9] 1964-ben részletesen elemezte egyensúlyi egységekből álló berendezések számításának problémáit. A szerzők szerint a /2.6/ - /2.9/ egyenletek felírása után a számításmenet kialakításához hat lényeges döntésre van szükség.

Az első az egyenletek csoportosítása hely vagy típus szerint. Ez a kérdés eldöntöttnek volt tekinthető már a cikk megjelenésekor, egy kivételével [12] ugyanis minden módszer - addig is, azóta is - a típus szerinti csoportosítást választotta, vagyis az azonos típusu egyenleteket oldotta meg az egész oszlopra egyszerre. A második az egyenletek kielégítésének sorrendjére vonatkozik. A szerzők szerint a legcélszerűbb - az egyensúlyi feltételek behelyettesítése után - először a komponensmérleg, utána az összegzési, majd a hőmérleg egyenletek kielégítése. A harmadik döntés legfontosabb. Azt kell eldönteni, hogy a /2.7/ és /2.9/ egyenletek közül melyiket használjuk fel a hőmérsékleteloszlás, és melyiket a folyadék- és gőzáramprofil korrigálására. A szerzők szerint - és ezt szemléletes példával támasztják alá - közeli forráspontu elegyek esetén, vagyis rektifikáló oszlopnál, az összegzési egyenleteket, ellenkező esetben - vagyis abszorbernél, extraktornál stb. - a hőmérleg egyenleteket kell a hőmérsékleteloszlás korrigá-

lására felhasználni. Bár harmadik alternatívaként az együttes korrekció is lehetséges, a szerzők álláspontját mégis lényegében helyesnek kell tartani. A cikk legnagyobb érdeme e kérdés fellelése és megválaszolása. A negyedik döntés az anyagmérleg egyenletek megoldási módszerének kiválasztása. Itt elsősorban numerikus problémákról, a kekkítési hibák propagációjáról van szó.

Az ötödik döntés az új hőmérsékletprofil számítására vonatkozik. Ha a harmadik döntésnél - helyesen - az összegzési egyenleteket választottuk, akkor a szerzők, a móltörtek normálása után, a buborékpont számítását javasolják. Mivel jelen munka egésze egy ettől eltérő koncepciót fejt ki, ezért itt ezt a kérdést nem részletezzük. A hatodik, 'utolsó' döntés az új folyadék- és gőzáram profil kiszámítására vonatkozik, és ismét elsősorban a numerikus problémák elkerülését célozza.

J. Willadsen a "Decision, Design and the Computer" szimpóziumon felkért hozzászólóként többek között a [14] és [15] előadásokhoz fűzött kommentárt [36]. Állásfoglalásában, elfogadva a buborékpont számítást mint a hőmérséklet korrigálásának módját, a konvergencia gyorsítására tett erőfeszítéseket helyeselte, az egyenletrendszerek szimultán kezelése helyett. Kifejtette azt a véleményét, hogy a különböző módszerek összehasonlítását nagymértékben elősegítené, ha azokat azonos tesztfeladatokon lehetne kipróbálni. Ilyen általánosan elfogadott mintafeladatok hiányát jelen munkákban is erősen éreztük.



#### 4. A KOLONNA-SZÁMITÁS ÚJ MÓDSZERE

A kidolgozott új módszer a komponensmérleg egyenletek megoldására megtartja a Wang-Henke-féle tridiagonális mátrix módszert, azonban más, a feladat természetéhez jobban illeszkedő hőmérsékletprofil korrekciót valósít meg.

##### 4.1. A módszer ismertetése

Tételezzük fel ismertnek a  $T_i$ ,  $L_i$  /és ezzel együtt  $V_i$ / értékeket, és írjuk fel ismét a /2.6/ komponensmérleg egyenletet egy általános tányérra úgy, hogy  $y_{i,j}$  helyébe  $k_{i,j} x_{i,j}$ -t helyettesítünk:

$$L_{i-1} x_{i-1,j} - [L_i + U_i + (V_i + W_i) k_{i,j}] x_{i,j} + V_{i+1} k_{i+1,j} x_{i+1,j} = -F_i z_{i,j} \quad /4.1/$$

Látható, hogy ha a /4.1/ egyenletet valamennyi tányérra felírjuk, akkor az  $x_{i,j}$ -kre olyan n ismeretlenes lineáris egyenletrendszer kapunk, amelynek mátrixa tridiagonális, vagyis a fődiagonális és a két mellette lévő elemen kívül az összes többi elem zérus. Legyen:

$$\begin{aligned} a_{i,j} &= L_{i-1} \\ b_{i,j} &= -[U_i + L_i + (V_i + W_i) k_{i,j}] \\ c_{i,j} &= V_{i+1} k_{i+1,j} \\ d_{i,j} &= -F_i z_{i,j} \end{aligned} \quad /4.2/$$



Ezekkel a jelölésekkel az egyenletrendszer a következő alakú:

$$\begin{bmatrix} b_{1,j} & c_{1,j} \\ a_{2,j} & b_{2,j} & c_{2,j} \\ & \ddots & \\ a_{i,j} & b_{i,j} & c_{i,j} \\ & \ddots & \\ a_{n,j} & b_{n,j} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1,j} \\ x_{2,j} \\ \vdots \\ x_{i,j} \\ \vdots \\ x_{n,j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_{1,j} \\ d_{2,j} \\ \vdots \\ d_{i,j} \\ \vdots \\ d_{n,j} \end{bmatrix}$$

/4.3/

Ez az egyenletrendszer Gauss-eliminációval igen könnyen és gyorsan megoldható. Legyen

$$p_{i,j} = c_{i,j} / (b_{i,j} - a_{i,j} p_{i-1,j})$$

és

/4.4/

$$q_{i,j} = (d_{i,j} - a_{i,j} q_{i-1,j}) / (b_{i,j} - a_{i,j} p_{i-1,j})$$

Ezzel a fenti egyenletrendszert a következő alakra hoztuk:

$$\begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & p_{1,j} & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & p_{2,j} & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 & p_{i,j} \\ & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1,j} \\ x_{2,j} \\ \vdots \\ x_{i,j} \\ \vdots \\ x_{n,j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_{1,j} \\ q_{2,j} \\ \vdots \\ q_{i,j} \\ \vdots \\ q_{n,j} \end{bmatrix}$$

/4.5/

amiből az  $x_{1,j}$  móltörtek az

$$x_{i,j} = q_{i,j} - p_{i,j} x_{i+1,j}, \quad (p_{n,j} = 0)$$

összefüggéssel számíthatók ki. Ezt a számítást természetesen valamennyi komponensre el kell végezni, hogy eredményül megkapjuk minden komponens folyadékfázisbeli móltörtjét minden tányéron. Ezzel teljesülnek a komponensmérleg egyenletek és a fázisegyensúlyi feltételek, de az  $x_{1,j}$  móltörtek összege az egyes tányérokra nem lesz egységnyi, és nincs biztosítva a hőmérleg teljesülése sem. A móltörtek összegének egytől való eltérése miatt a kapott  $x_{1,j}$  értékek csak egy számítás közbeeső eredményeinek tekinthetők és semmiféle fizikailag létező vagy létező állapotot nem reprezentálnak. Az összegzési és hőmérleg egyenletek teljesülését az előre felvett  $T_1$  és  $L_1$  értékek korrigálásával kell elérni. Erre elvileg kétféle lehetőség volna, desztillációs számításnál azonban az a célszerű [9], ha a hőmérséklet profilt az összegzési, a folyadékáram profilt a hőmérleg egyenletek alapján korrigáljuk. Módszerünk ennél a pontnál tér el a Wang-Henke-félétől.

Az egyenletrendszer szerkezetéből következően bármely  $T_i$  hőmérséklet megváltoztatása maga után vonja valamennyi  $x_{i,j}$  érték megváltozását. Ezért elvileg is hibás a Wang-Henke-módszerben az az elgondolás, hogy a  $T_i$  hőmérsékletet úgy határozzuk meg, hogy  $\sum_j k_{i,j} x_{i,j} = 1$  legyen. Ehelyett változtassuk meg valamennyi  $T_i$ -t  $(T_i + \Delta T_i)$ -re és írjuk fel újból a komponensmérleg egyenleteket. A tányér-hőmérséklet megváltoztatása következtében természetesen  $k_{i,j}$  is megváltozik, amit lineárisan közelítve:

$$\Delta k_{i,j} = \left( \frac{dk_{i,j}}{dT} \right)_{T=T_i} \Delta T_i \quad /4.6/$$

A /2.4/egyenlet alapján

$$\Delta k_{i,j} = - \frac{k_{i,j}}{T_{abs,i}^2} \Delta T_i \quad /4.7/$$

Igy a komponensmérlegek:

$$\begin{aligned} & L_{i-1} (x_{i-1,j} + \Delta x_{i-1,j}) - [L_i + U_i + (V_i + W_i)(k_{i,j} + \Delta k_{i,j})] \\ & (x_{i,j} + \Delta x_{i,j}) + V_{i+1} (k_{i+1,j} + \Delta k_{i+1,j})(x_{i+1,j} + \Delta x_{i+1,j}) = \\ & = -F_i z_{i,j} \end{aligned} \quad /4.8/$$

Kifejtve, és a másodrendűen kis mennyiségeket elhanyagolva:



$$\begin{aligned}
 & L_{i-1} x_{i-1,j} - [L_i + U_i + (V_i + W_i) k_{i,j}] x_{i,j} + V_{i+1} k_{i+1,j} x_{i+1,j} + \\
 & + L_{i-1} \Delta x_{i-1,j} - [L_i + U_i + (V_i + W_i) k_{i,j}] \Delta x_{i,j} + V_{i+1} k_{i+1,j} \Delta x_{i+1,j} - \\
 & - (V_i + W_i) \Delta k_{i,j} x_{i,j} + V_{i+1} \Delta k_{i+1,j} x_{i+1,j} = -F_i z_{i,j} \quad /4.9/
 \end{aligned}$$

Ebből a /4.1/ egyenletet levonva, átrendezve és a  $\Delta k$ -kat  $\Delta T$ -vel kifejezve kapjuk:

$$\begin{aligned}
 & L_{i-1} \Delta x_{i-1,j} - [L_i + U_i + (V_i + W_i) k_{i,j}] \Delta x_{i,j} + \\
 & + V_{i+1} k_{i+1,j} \Delta x_{i+1,j} = \\
 & = (V_i + W_i) x_{i,j} \frac{dk_{i,j}}{dT} \Delta T_i - V_{i+1} x_{i+1,j} \frac{dk_{i+1,j}}{dT} \Delta T_{i+1} \\
 & \quad \quad \quad /4.10/
 \end{aligned}$$

vagy összevonva:

$$a_i \Delta x_{i-1,j} + b_i \Delta x_{i,j} + c_i \Delta x_{i+1,j} = \beta_i \Delta T_i + \gamma_i \Delta T_{i+1} \quad /4.11/$$

ahol

$$\beta_i = (V_i + W_i) x_{i,j} \frac{dk_{i,j}}{dT} \quad /4.12/$$

és

$$\gamma_i = -V_{i+1} x_{i+1,j} \frac{dk_{i+1,j}}{dT} \quad /4.13/$$

A /4.11/ egyenlet bal oldala teljesen hasonló /4.1/-hez, a jobb oldalon azonban a szintén ismeretlen  $\Delta T_1$ -k állnak. Így, ha a bal oldalakat  $\Delta x_{i,j}$ -re meg akarjuk oldani, akkor a jobb oldalakat mint szimultán egyenleteket kell felfogni és eredményként

$$x_{i,j} = \rho_{i,1,j} \Delta T_1 + \rho_{i,2,j} \Delta T_2 + \dots + \rho_{i,n,j} \Delta T_n \quad /4.14/$$

alku lineáris kifejezést kapunk. A komponensekre összegezve kapjuk a céljainkhoz szükséges

$$\Delta S_i = r_{i,1} \Delta T_1 + r_{i,2} \Delta T_2 + \dots + r_{i,n} \Delta T_n \quad /4.15/$$

kifejezést, ahol

$$\Delta S_i = \sum_j \Delta x_{i,j} \quad /4.16/$$

és

$$r_{i,k} = \sum_j \rho_{i,k,j} \quad /4.17/$$

Ezzel előállt a móltörtek összegének megváltozása mint tányérhőmérsékletek megváltoztatásának közelítő lineáris függvénye. A kívánt  $\Delta T_1$  korrekciót ezen egyenletrendszer megoldásával számíthatjuk ki, ha  $\Delta S_i$  helyébe  $1 - \sum_j x_{i,j}$ -t helyettesítünk.

Totálkondenzátor esetén a kondenzátorra felírt korrigált komponensmérleg nem függ  $T_1$ -től, így a /4.14/ egyenletben  $\rho_{i,1,j}$  és ezért /4.15/-ben  $r_{i,1}$  értéke zérus. Eggyel kevesebb ismeretlenünk lé-

vén, eggyel kevesebb egyenletet kell venni a  $\Delta T_{1-k}$ ,  $i=2,3,\dots,n$ , kiszámításához,  $T_1$  értékét pedig abból a feltevésből számítjuk ki, hogy a fejtermék buborékponton lévő folyadék, vagyis

$$\sum_j k_{1,j} x_{1,j} = 1 \quad /4.18/$$

A folyadék- és gőzáramprofil korrigálására a /2.5/ bruttó anyagmérleg és /2.7/ hőmérleg egyenleteket használjuk. A számítással az oszlop tetőjéről indulva tányérról tányérra haladhatunk lefelé. Ha ugyanis  $L_{i-1}$  és  $V_i$  ismert, /márpedig  $L_1$ -et és  $V_2$ -t ismerjük/, akkor ezek kétismeretlenes lineáris egyenletrendszerként jelentenek  $L_i$  és  $V_{i+1}$ -re.

Az így kapott korrigált  $T_i$ ,  $L_i$  és  $V_i$  értékekkel a számítást megismételve az iterációt addig folytatjuk, migcsak a móltörtek összege minden tányéron az előírt hibahatáron belül meg nem közelíti az egyet, és a hőmérleg is kellő pontossággal nem teljesül.

Az új számítási módszerrel kapcsolatban a következő kérdések merülnek fel:

a/ a  $\sum_j x_{1,j} = 1$  egyenletek teljesülése biztosítja-e, hogy a gőzfázisbeli móltörtek összege is egységnyi legyen,

b/ a módszer konvergens-e,

c/ a módszer számítási időszükséglet szempontjából gazdaságos-e, illetve nem lehetne-e gazdaságosságot javítani.

A továbbiakban e kérdésekkel foglalkozunk.



#### 4.2. A feltételek elégségessége

Írjuk fel a komponensmérleg egyenletet a visszafordítóra:

$$L_{n-1} x_{n-1,j} - (U_n + V_n k_{n,j}) x_{n,j} = 0 \quad /4.19/$$

és összegezzük valamennyi komponensre:

$$L_{n-1} \sum_j x_{n-1,j} - U_n \sum_j x_{n,j} - V_n \sum_j k_{n,j} x_{n,j} = 0 \quad /4.20/$$

Ha feltételezzük, hogy  $\sum_j x_{1,j} = 1$ , minden  $i$ -re, akkor

$$L_{n-1} - U_n - V_n \sum_j k_{n,j} x_{n,j} = 0 \quad /4.21/$$

Mivel a globális anyagmérlegből

$$L_{n-1} - U_n - V_n = 0 \quad /4.22/$$

tehát

$$\sum_j k_{n,j} x_{n,j} = \sum_j y_{n,j} = 1 \quad /4.23/$$

kell hogy legyen.

Most írjuk fel az egyenleteket egy általános tányérra

$$L_{i-1} x_{i-1,j} - [L_i + U_i + (V_i + W_i) k_{i,j}] x_{i,j} + V_{i+1} k_{i+1,j} x_{i+1,j} = -F_i z_{i,j} \quad /4.24/$$

és összegezzük komponensek szerint

$$L_{i-1} \sum_j x_{i-1,j} - (L_i + U_i) \sum_j x_{i,j} - (V_i + W_i) \sum_j k_{i,j} x_{i,j} + \\ + V_{i+1} \sum_j k_{i+1,j} x_{i+1,j} = -F_i \quad /4.25/$$

Ismét felhasználva, hogy  $\sum_j x_{i,j} = 1$  és

$$L_{i-1} - L_i + U_i - V_i + W_i + V_{i+1} = F_i \quad /4.26/$$

kapjuk, hogy

$$(V_i + W_i) (1 - \sum_j k_{i,j} x_{i,j}) = V_{i+1} (1 - \sum_j k_{i+1,j} x_{i+1,j}) \quad /4.27/$$

Ebből  $i=n-1$  helyettesítéssel a /4.23/ alapján következik, hogy

$$\sum_j k_{n-1,j} x_{n-1,j} = 1 \quad /4.28/$$

és tányérről tányérra felfelé haladva minden tányérra beláthatjuk, hogy

$$\sum_j k_{i,j} x_{i,j} = 1 \quad /4.29/$$

Ezzel bebizonyítottuk, hogy ha  $\sum_j x_{i,j} = 1$ ,

és a hőmérleg egyenletek teljesülnek, akkor algoritmusunk minden kielégítendő egyenletet kielégített, vagyis elvezetett a feladat megoldásához.

#### 4.3. A módszer konvergenciája

Mint azt a bevezetőben említettük, matematikailag mindeddig nem bizonyított, hogy a /2.5/ - /2.9/ egyenletekkel megfogalmazott feladatnak egyáltalán van-e, és ha igen, hány megoldása van. És bár erős szemléletes érv szól amellett, hogy a fizikailag reális tartományban léteznie kell egyértelmű megoldásnak, az irodalomban ismertetett egyetlen, módszerről sem bizonyították be, hogy biztosan elvezet a megoldáshoz - feltéve természetesen, hogy az létezik.

Egzakt bizonyítást e kérdésekre nekünk sem sikerült adni. E fejezetben két, a kívátnál gyengébb állítást bizonyítottunk be, amelyek azonban valószínűleg fontos lépések a teljes bizonyítás felé vezető uton.

4.3.1. Állítás: A komponensmérleg egyenletek mindig megoldhatók, és az eredményben  $x_{i,j} > 0$ , minden  $i$ -re és  $j$ -re.

Bizonyítás: Tételizzük fel először, hogy csak egy betáplálás van, mégpedig a  $p$ -edik tányérra. Vizsgáljuk meg a komponensmérleg egyenleteket /4.1/. A jobb oldalon a  $p$ -edik egyenletet kivéve csupa zérus áll. Az első egyenletből

$$-(U_1 + V_1^{k_{1,j}}) x_{1,j} + V_2^{k_{2,j}} x_{2,j} = 0 \quad /4.30/$$

nyilvánvaló, hogy  $x_{1,j}$  és  $x_{2,j}$  előjele megegyezik.



Ha az egyenleteket a  $p-1$ -edikig sorra összeadjuk, belátható, hogy az  $x_{i,j}$ -k előjele megegyezik  $i=1,2,\dots,p$ -re. Ugyanezt az  $n$ -edik egyenlettől visszafelé elvégezve belátható, hogy az  $x_{i,j}$ -k előjele azonos  $i=n,n-1,\dots,p$ -re, vagyis  $i=1,2,\dots,n$ -re is  $/p$  tagja mindkét sorozatnak/. Valamennyi egyenlet összegét véve viszont azt kapjuk, hogy:

$$-\sum_{i=1}^n (U_i + W_i k_{i,j}) x_{i,j} = -F_p^z p,j \quad /4.31/$$

így az  $x_{i,j}$ -k közös előjele pozitív.

Ha több betáplálás van, akkor a jobboldalt tekintsük olyan vektorok összegének, amelyek mindegyikében csak egy nem zérus elem van. A /4.1/ egyenletrendszer e jobboldalakkal megoldva, az eredmény - a fenti gondolatok alapján - minden esetben csupa pozitív számból fog állni, s e megoldások összege - ismét csupa pozitív szám - jelenti az eredeti /4.1/ egyenletrendszer megoldását.

Be kell még látni, hogy a /4.1/ egyenletrendszer mátrixa sohasem szinguláris. Ennél azonban többet is lehet bizonyítani, nevezetesen, hogy a mátrix negatív definit. Legyen a legfelső betáplálás a  $p$ -edik tányéron és végezzük el a Gauss-eliminációt úgy, hogy minden sorhoz az előző annyiszorosát adjuk, hogy a főátló alatti elemek zérusok legyenek. Ekkor a következő egyenletrendszert kapjuk:

$$\begin{bmatrix} b'_{1,j} & c_{1,j} \\ & b'_{2,j} & c_{2,j} \\ & & \ddots \\ & & & b'_{p,j} & c_{p,j} \\ & & & & b'_{n,j} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1,j} \\ x_{2,j} \\ \vdots \\ x_{i,j} \\ \vdots \\ x_{n,j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ d'_{p,j} \\ d'_{p+1,j} \\ \vdots \\ d'_{n,j} \end{bmatrix}$$

/4.32/

ahol  $b'_{1,j} = (b_{1,j} - a_{1,j} c_{1-1,j}) / b'_{1-1,j}$

és

$$d'_{1,j} = (d_{1,j} - d'_{1-1,j} a_{1,j}) / b'_{1-1,j}, \left( c_{0,j} = a_{1,j} = 0 \right)$$

Az első  $p-1$  egyenletből belátható - mivel valamennyi  $x_{1,j}$  és  $c_{1,j}$  pozitív -, hogy  $b'_{1,j} < 0$ ,  $i=1,2,\dots,p-1$ -re. Ugyancsak látható - mivel  $d'_{p,j} < 0$  -, hogy  $b'_{p,j} < 0$ .

Ezután lépésről lépésre bebizonyítható, hogy

$$d'_{p+1,j}, b'_{p+1,j}, d'_{p+2,j}, \dots, d'_{n,j}, b'_{n,j} < 0.$$

Összefoglalva:  $b'_i < 0$ ,  $i=1,2,\dots,n$ -re. Mivel az eredeti mátrix bármely sarokaldeterminánsa a megfelelő  $b'_i$ -k szorzata, ezért az eredeti mátrix negatív definit.

Ezzel állításunkat teljesen bebizonyítottuk.

4.3.2. A konvergencia - bizonyos feltételek melletti - biztosítására módszerünket egy lépéshossz-csökkentési algoritmussal kell kiegészíteni, vagyis a  $T_1$  tényérhőmérsékleteket a /4.15/ alapján kiszámított  $\Delta T_1$  helyett csak  $\lambda \Delta T_1$ -vel szabad korrigálni, ahol  $\lambda$  alkalmasan megválasztott konstans  $/0 < \lambda \leq 1/$ .

A bizonyításhoz rögzítsük az  $L_i$  értékeket és definiáljuk a

$$\phi(T_1, \dots, T_n) = \sum_{k=1}^n [\Delta S_k(T_1, \dots, T_n)]^2 \quad /4.33/$$

függvényt. Ennek értéke sehol nem negatív. Zérus is csak ott lehet, ahol valamennyi  $\Delta S_k$  zérus, vagyis éppen a keresett megoldáspontban. Így a  $\phi$  függvényt a közelítés mértékének tekinthetjük. A 4.1. pontban leírt számításmenet tulajdonképpen a  $\Delta S_k = \phi_k(T_1, \dots, T_n)$  nemlineáris egyenletrendszer megoldásának Newton-Raphson-iterációval való közelítése. Mátrixalgebrai jelöléseket használva, a



$$\underline{J} \underline{\Delta T} = \underline{\Delta S}$$

lineáris egyenletrendszerrel oldjuk meg, ahol  $\underline{J}$  a

$$\frac{\partial S_k}{\partial T_1} \quad \text{parciális deriváltakból összeállított}$$

Jacobimátrix.

Állítás: ha a  $T_1$  hőmérsékletek  $n$  dimenziós térben  $\underline{J}$  determinánsa sehol sem zérus, és a

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial T_1 \partial T_k} \quad \text{másodrendű parciálisok folytonosak és}$$

korlátosak, akkor módszerünk - alkalmasan megválasztott  $\lambda$  mellett - konvergens.

Bizonyítás: ha  $\det |\underline{J}|$  a  $\underline{T} = \underline{T}^0$  pontban nem zérus, akkor létezik a

$$\underline{\Delta T} = \underline{J}^{-1} \underline{\Delta S} \quad /4.34/$$

korrekciós vektor. A  $\underline{T} = \underline{T}^0 + \lambda \underline{\Delta T}$  vektor a hőmérsékletek terében egyenest reprezentál. Ezen egyenes mentén a  $\phi(\lambda)$  függvény  $\lambda$ -nak egyváltozós függvénye. Fejtsük ezt  $\underline{T}^0$  körül Taylor-sorba.

$$\phi(\lambda) = \phi(0) + \left( \frac{d\phi}{d\lambda} \right)_{\lambda=0} \lambda + \frac{1}{2} \left( \frac{d^2\phi}{d\lambda^2} \right)_{\lambda=0} \lambda^2$$

/4.35/

$$\left( \frac{d\phi}{d\lambda} \right)_{\lambda=0} = \sum_{k=1}^n \frac{\partial \phi}{\partial T_k} \frac{T_k}{\partial \lambda} = \sum_{k=1}^n \frac{\partial \phi}{\partial T_k} \Delta T_k \quad /4.36/$$

A /4.33/ egyenletből

$$\frac{\partial \phi}{\partial T_k} = \sum_i 2 \Delta S_i^0 \frac{\partial \Delta S_i}{\partial T_k} \quad /4.37/$$

amit /4.36/-ba helyettesítve

$$\left( \frac{d\phi}{d\lambda} \right)_{\lambda=0} = 2 \sum_k \sum_i \Delta S_i^0 \frac{\partial \Delta S_i}{\partial T_k} \Delta T_k = 2 \sum_i \Delta S_i^0 \left( \sum_k \frac{\partial \Delta S_i}{\partial T_k} \Delta T_k \right) \quad /4.38/$$

A korrekciós egyenletből

$$\sum_k \frac{\partial \Delta S_i}{\partial T_k} \Delta T_k = -\Delta S_i^0 \quad /4.39/$$

amiből

$$\left( \frac{d\phi}{d\lambda} \right)_{\lambda=0} = -2 \sum_i \left( \Delta S_i^0 \right)^2 = -2\phi^0 \quad /4.40/$$

A másodrendű parciálisok korlátos volta miatt

$$\left( \frac{d^2 \phi}{d\lambda^2} \right)_{\lambda=0} < R \quad /4.41/$$

amiből következik, hogy

$$\phi(\lambda) < \phi_R(\lambda) = \phi^0 - 2\phi^0\lambda + R\lambda^2 \quad /4.42/$$

ahol  $\phi_R(\lambda)$  a  $\phi(\lambda)$  függvény felső becslése. Ebből látható, hogy a  $\phi_R$  függvény a  $\lambda = 0$  pont környezetében csökkenő és minimumát a  $\lambda = \phi^0/R$  helyen éri el. Itt

$$\begin{aligned} \phi_{R,\min} &= \phi^0 - 2(\phi^0)^2/R + (\phi^0)^2/R = \\ &= \phi^0(1 - \phi^0/R). \end{aligned} \quad /4.43/$$

Ha tehát  $\lambda$ -t  $\phi^0/R$ -nek választjuk, akkor a függvény korrekció utáni értékére a következő becslést kapjuk

$$\phi^1 < \phi_R^1 = \phi^0 \left( 1 - \frac{\phi^0}{R} \right) \quad /4.44/$$

Ezt lépésről-lépésre megismételve a

$$\phi^{r+1} < \phi^r \left( 1 - \frac{\phi^r}{R} \right) \quad /4.45/$$

sorozatot kapjuk. Ez a sorozat monoton csökkenő, nem negatív, vagyis alulról korlátos, tehát konvergens. Határértéke nem lehet  $\phi^\infty > 0$ , mert elég nagy  $r$ -re fenn kell állnia a  $\phi^{\infty+\varepsilon} > \phi^r > \phi^\infty$  relációnak. Válasszuk viszont  $\varepsilon$ -t  $(\phi^\infty)^2/R$ -nél kisebbre. Ekkor

$$\phi^{r+1} \leq \phi^r - \frac{(\phi^r)^2}{R} < \phi^r - \varepsilon < \phi^\infty \quad /4.46/$$



lenne, ami nyilvánvaló ellentmondás, tehát a sorozat határértéke zérus, vagyis az így definiált pontsorozat feladatunk megoldásához konvergál.

Ennek a bizonyításnak elsősorban elméleti értéke van. A tett feltevések - hogy a Jacobi-mátrix nem szinguláris és hogy a második deriváltak korlátosak - általában teljesülnek, és így azt bizonyítottuk, hogy módszerünk az esetek nagy többségében elvezet a feladat megoldásához. A gyakorlati számítások számára azonban ez a gondolatmenet nem elegendő. Ez ugyanis csak egzisztenciabizonyítás, vagyis azt állítjuk, minden iterációban létezik céljainknak megfelelő  $\lambda$ , de a bizonyítás semmit nem mond arra vonatkozólag, hogy egyáltalán szükség van-e a lépéshossz csökkentésére, és ha igen, hogyan kell a  $\lambda$ -t kiszámítani. R-t ugyanis nem ismerjük,  $\phi_R$  különben is nagyon durva becslés lehet.

A számítógépi programba /lásd 6.1 pont/ olyan algoritmust építettünk be, amely a  $\lambda = 0$  és  $\lambda = 1$  pontbeli  $\Delta S_1$ -k abszolút értéke és ezek  $\lambda = 0$  pontbeli deriváltja alapján másodfoku polinomokkal közelíti a hibákat, és abban az esetben, ha a hibák abszolút összege  $\lambda = 1$ -nél nagyobb, mint  $\lambda = 0$ -nál,  $\lambda - t$  e közelítő parabolák minimuma alapján számítja ki.

## 5. SZÁMITÁSTECHNIKAI KÉRDÉSEK

Bonyolult rektifikáló oszlopok számítására az utóbbi években már kidolgoztak többé-kevésbé jó számítási eljárásokat, illetve gépi programokat. Ezért, ha új módszerünkkel szemben azzal az igénnyel lépünk fel, hogy az a gyakorlatban az eddigieknél jobban használható legyen, akkor alaposan elemeznünk kell a számítástechnikai problémákat, elsősorban a gépidő-igényt. E fejezetben ezekkel a kérdésekkel és a módszer módosítási lehetőségeivel foglalkozunk.

### 5.1. Gépidő-igény

A gépidő-igény abszolút értéke természetesen a használt számítógéptől és programnyelvtől függ, amittől viszont tudományos igényű általános tárgyalásnál lehetőleg el kell vonatkoztatni. Ezt az ellentmondást úgy igyekszünk feloldani, hogy azt vizsgáljuk, hogy a számítási algoritmus egyes lépéseinek munkaigénye hogyan függ a feladat méreteitől, vagyis a komponensek, illetve tényérok számától. Ez ugyanis a számítási idő-igényt géptől függetlenül elég jól jellemzi. Az összehasonlítás alapja ismét a Wang-Henke-módszer.

Elegendő egy-egy iteráció munkaigényét és az iterációk számát vizsgálni, mert jó közelítéssel feltételezhetjük, hogy az előkészítő számítások, illetve az eredménykiiratás gépidő-szükséglete elhanyagolható.

Mindkét módszer alkalmazásánál  $m$  számú komponensmérleg egyenletrendszerrel kell megoldani. Az



egyenletek száma  $n$ , mind a megfelelő  $a$ ,  $b$ ,  $c$  és  $d$  együtthatók kiszámítása, mind a megoldás  $n$ -szer lefutó ciklusban történik, tehát az egész számítás időigénye  $m \times n$ -nel arányos. A kapott móltörtteket normálni kell, ami szintén  $m \times n$ -nel arányos munka. A hőmérséklet korrigálása a Wang-Henke-módszer-nél buborékpont számítást igényel minden tényéron, amelyhez belső iterációra van szükség, és minden iteráció időszükséglete  $m$ -mel arányos, így az egész korrekció időigénye arányos a komponensek, tényérok és belső iterációk számának szorzatával. A folyadék- és gőzáram korrekciók szintén tényéronként történnek, közben a fajlagos entalpiákat komponensenként kell összegezni, tehát szintén  $m \times n$ -nel arányos gépidőszükséglet lép fel.

Összefoglalva elmondhatjuk tehát, hogy a Wang-Henke-módszernél egy-egy iteráció során az elvégzendő műveletek legnagyobb részének munkaigénye legfeljebb  $m \times n$ -nel arányos. A legmunkaigényesebb rész a hőmérsékletek korrigálása, ahol belső iterációra is szükség van, ráadásul a  $k_{i,j}$  egyensúlyi állandó kiszámításához időigényes exponenciális függvényszámítást is kell végezni.

Az általunk kidolgozott módszernél minden iterációban fellép egy lineáris egyenletrendszer megoldás, amelynek időszükséglete  $n^3$ -nal arányos, és ezen egyenletrendszer együtthatómátrixának előállítása komponensenkénti összegzéssel történik, ami  $m \times n^2$ -tel arányos munkát igényel. Ezzel szemben elmarad a Wang-Henke-módszer legmunkaigényesebb része, a hőmérsékletkorrekció.



Mivel nálunk  $n$ -nek magasabb hatványai szerepelnek, mindenesetre nyilvánvaló, hogy a tányérszám növekedésével módszerünk versenyképessége romlik. E kedvezőtlen tendenciát lassítja az a tény, hogy a Wang-Henke-módszer alkalmazása esetén a feladat megoldásához szükséges iterációk száma a tányérszám növekedésével általában nő, míg az új módszernél attól lényegében független.

Ahhoz, hogy az új módszer versenyképességét minél nagyobb tányérszámig megtartsuk, szükség van az új algoritmus számítástechnikai finomítására, elsősorban a már említett két kritikus ponton. A lineáris egyenletrendszer megoldásánál könnyebb helyzetben vagyunk, mert míg a program egésze magas szintű programnyelven /célszerűen ALGOL-ban/ készül, addig szinte minden gép programkönyvtára rendelkezik kifinomult, gyors, általában gépi kódban írt lineáris egyenletrendszer megoldó eljárással. Ennek időszükséglete a saját készítésűnek  $1/5 - 1/20$ -a is lehet.

Ezek felhasználásával elérhető volt, hogy mintegy 30-40 tányérnál a lineáris egyenletrendszer megoldásához és a számítás többi részéhez szükséges idő összemérhető volt.

A számítás gyors elvégezhetőségének kulcslépése tehát a /4.1/ szimultán korrekciós egyenletrendszer gyors megoldása. Írjuk fel a teljes egyenletrendszert mátrix-vektor szorzat formájában, az egyszerűség kedvéért a  $j$  komponens-indexet elhagyva /1. következő oldalt/. Vezessük be a következő jeleléseket, illetve számítsuk ki a következő mennyiségeket:

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ & \ddots & \\ a_i & b_i & c_i \\ & \ddots & \\ a_n & b_n & c_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \\ \vdots \\ \Delta x_i \\ \vdots \\ \Delta x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_1 & \gamma_1 \\ \beta_2 & \gamma_2 \\ & \ddots \\ \beta_i & \gamma_i \\ & \ddots \\ \beta_n & \gamma_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta T_1 \\ \Delta T_2 \\ \vdots \\ \Delta T_i \\ \vdots \\ \Delta T_n \end{bmatrix}$$

/5.1/

$$s_1 = b_1 - a_1 p_{1-1}$$

$$p_1 = c_1 / s_1$$

$$r_1 = -r_{1-1} a_1 / s_1 \quad /5.2/$$

$$t_1 = -t_{1-1} p_1, \text{ ahol } r_0 = t_0 = s_0 = a_1 = c_n = 1 \text{ ill. } p_0 = 0$$

Mint már a /4.3/-/4.5/ egyenleteknél láttuk, a Gauss-elimináció első részében minden sorból levonjuk a felette lévő  $a_1$ -szeresét, majd a sort elosztjuk a főátlóban álló számmal, ami éppen az /5.2/-ben definiált  $s_1$ .

Tekintsük az /5.1/ jobboldalának  $k$ -adik sorát. Ebben eredetileg csak két nem-zérus elem áll /lásd /5.6/ első oszlopát/. Az elimináció során az első  $k-2$  oszlopban álló zérus nem változik, a  $k-1$ -edik sorba  $\gamma_k / s_{k-1}$ , a  $k$ -adikba  $(\beta_k - a_k \gamma_k / s_{k-1}) / s_k$  kerül. Ha bevezetjük a

$$w_k = -(\beta_k / a_k - \gamma_k s_{k-1}) / r_{k-1} \quad /5.3/$$

jelölést, akkor a  $k$ -adik sor  $r_k w_k$  alakba írható. /Ezt a helyzetet mutatja a /5.6/ második oszlopa./ Az eliminálást a  $k+1$ -edik sortól tovább folytatva, most már az  $i$ -edik elem a felette álló  $-a_1 / s_1$ -szerese vagyis az /5.2/ alapján  $r_1 / r_{1-1}$ -szerese lesz. Így kapjuk a /5.6/ harmadik oszlopát. A félig eliminált egyenletrendszer bal oldala formailag megegyezik /4.5/ bal oldalával. A visszahelyettesítésnél ahhoz, hogy a baloldalon az egységmátrixot



kapjuk, az  $i$ -edik sorhoz az alatta lévő  $-p_i$ -szeresét kell adni. A  $k$ -adik sorig haladva, bevezetve a

$$q_i = r_i - p_i q_{i+1}, \left( q_{n+1} = 0 \right) \quad /5.4/$$

jelölést, a helyzetet az /5.6/ negyedik oszlopa mutatja. Tovább haladva, a  $k-1$ -edik sorba

$(\gamma_k / s_{k-1} - w_k q_k p_{k-1})$ , ettől felfelé az  $i$ -edik sorba az alatta levő  $(-p_i)$ -szerese kerül. Ha még bevezetjük a

$$z_k = (\gamma_k / s_{k-1} - w_k q_k p_{k-1}) / t_{k-1} \quad /5.5/$$

jelölést, akkor végeredményben a jobboldal  $k$ -adik oszlopába a /5.6/ ötödik oszlopában látható mennyiségek kerülnek.

1	0	0	0	0	$z_k^t_1$
2	0	0	0	0	$z_k^t_2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$k-2$	0	0	0	0	$z_k^t_{k-2}$
$k-1$	$\gamma_{k-1}$	$\gamma_{k-1}/s_{k-1}$	$\lambda_{k-1}/s_{k-1}$	$\gamma_{k-1}/s_{k-1}$	$z_k^t_{k-1}$
$k$	$\beta_k$	$w_k^r_k$	$w_k^r_k$	$w_k^q_{k+1}$	$w_k^q_{k+1}$
$k+1$	0	0	$w_k^r_{k+1}$	$w_k^q_{k+1}$	$w_k^q_{k+1}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$n$	0	0	$w_k^r_n$	$w_k^q_n$	$w_k^q_n$
	(a)	(b)	(c)	(d)	(e)

/5.6/

A teljes jobboldal ennek megfelelően a következő

$$\begin{bmatrix} w_1^q_1 & z_2^t_1 & z_3^t_1 & \dots & z_n^t_1 \\ w_1^q_2 & w_2^q_2 & z_3^t_2 & & . \\ . & & w_3^q_2 & & . \\ . & & & \ddots & . \\ . & & & & z_n^t_{n-1} \\ w_1^q_n & w_2^q_n & \dots & & w_n^q_n \end{bmatrix} \quad /5.7/$$

A gondolatmenetből látható, hogy a  $p$ ,  $q$ ,  $s$ ,  $t$ ,  $u$ ,  $w$ , és  $z$  mennyiségek kiszámításának időszükséglete  $n$ -nel arányos, míg  $n^2$ -tel arányos munka csak az [5.7] mátrix kitöltése /vagy más szóval a [4.14] képlet  $\rho$  együtthatóinak kiszámítása/:

$$\rho_{i,k,j} = \begin{cases} w_k q_{i1}, & \text{ha } k \leq i \\ z_k t_{i1}, & \text{ha } k > i \end{cases} \quad [5.8/$$

Ezt a számítást természetesen minden komponensre el kell végezni, és képezni kell az

$$r_{i,k} = \sum_j \rho_{i,k,j} \quad [5.9/$$

összegeket (lásd [4.17/ ) , amely  $r_{i,k}$  mennyiségek lesznek a korrekciós egyenletrendszer együtthatói. Így az  $m \times n^2$ -tel arányos időszükségletű számítást sikerült egyetlen döntésre, szorzásra és összeadásra redukálni.

## 5.2. A módszer módosítási lehetőségei

Ebben a fejezetben néhány gondolatot írunk le, amelynek célja az előzőekben ismerttetett számítási algoritmus módosítása, javítása, különleges körülményekre - nagy tányérszám, cirkulációs reflux - való alkalmazása.



### 5.2.1. Nagy tényérszámok

Mivel a módszer  $n$  ismeretlenes lineáris egyenletrendszer megoldását kívánja, a tényérszám növekedésével a számítási időigény erősen növekszik. A korrekciós egyenletek másféle csoportosításával elérhető, hogy a megoldandó egyenletrendszer mérete ne a tényérok, hanem a komponensek számával legyen azonos. Az egyes móltörtek  $\Delta x_{i,j}$  korrekciója ugyanis - tényérről-tényérre felfelé haladva - kifejezhető mint a  $\Delta x_{n,j}$ -k lineáris függvénye. Legyenek már ismertek

$$\begin{aligned}\Delta x_{i+1,j} &= \alpha_1 (\Delta x_{-n}) \\ \Delta x_{i,j} &= \alpha_2 (\Delta x_{-n}) \\ \Delta T_{i+1} &= \alpha_3 (\Delta x_{-n})\end{aligned} \quad / 5.10/$$

lineáris függvények együtthatói. Ekkor a /4.11/ egyenletből

$$x_{i-1,j} = \mu_{i,j} T_i + \alpha_4 (\Delta x_{-n}) \quad /5.11/$$

amit a komponensekre összegezve, és  $\Delta S_{i-1}$  helyére az ismert  $1 - \sum_j x_{i,j}$ -t írva:

$$\Delta S_{i-1} = \Delta T_i \sum_j \mu_{i,j} + \alpha_5 (\Delta x_{-n}) \quad /5.12/$$

és így

$$\Delta T_i = \alpha_6 (\Delta x_{-n}) \quad /5.13/$$

Az /5.11/-be visszahelyettesítve

$$\Delta x_{1-1,j} = \alpha_7 (\Delta x_n) \quad /5.14/$$

ahol  $\alpha (\Delta x_n)$  általában  $\Delta x_n$ -nek valamilyen lineáris függvényét jelenti. A második tényérra felírt egyenletekig eljutva megkapjuk  $\Delta x_{1,j} = \alpha_8 (\Delta x_n)$  függvények együtthatóit. Az első tényérra felírt egyenletekbe behelyettesítve viszont éppen  $m$  számú lineáris egyenletet kapunk a  $\Delta x_{n,j}$ -kre.

Ez a módosítás a módszer elvét nem érinti, gépidő-szükséglete nagy tényérszámok és kevés komponens esetén kisebb. Programját nem készítettük el, ismertetését csak az elvi lehetőség megmutatására tartottuk szükségesnek.

#### 5.2.2. A linearitás javítása

A másik gondolat az eredeti módszerben a szükséges iterációk számát igyekszik csökkenteni. A  $k(T)$  függvényeknek egyenessel való közelítése nagyobb  $\Delta T$ -k esetén komoly hibákat eredményezhet. Célszerű lenne tehát a hőmérsékletek helyett olyan független változókat választani, amelyeknek függvényében a megoszlási hányadosok linearitása jobban biztosított. Magát a  $k_{1,j}$  értéket nem választhatjuk, mert a független változónak minden komponensre azonosnak kell lennie. A megoszlási hányadosok hő-

mérsékletfüggése /lásd /2.4// azonban átírható a következőképpen:

$$\ln k_{i,j} = k_j^{(1)} + \frac{K_i}{T_{abs,i}} \frac{k_j^{(2)}}{K_i} \quad /5.15/$$

A független változó

$$\ln \tau_i = \frac{K_i}{T_{abs,i}} \quad /5.16/$$

transzformációja után a  $k(\tau)$  függvény akkor lesz közel lineáris, ha  $k_j^{(2)} / K_i \approx 1$ . Ezt a

$$K_i = \frac{\sum_j k_j^{(2)} x_{i,j}}{\sum_j x_{i,j}} \quad /5.17/$$

választással közelíthetjük meg. E transzformációt végrehajtva, a /4.11/ egyenlet  $\Delta x_{i,j}$ -t természetesen a  $\Delta \tau_i$ -k függvényében adja meg, amit megoldás után vissza kell számolni  $\Delta T_i$ -re.

### 5.2.3. Cirkulációs refluxok

Az ásványolajipari - több elvételes - rektifikáló oszlopoknál közbenső hűtésre elterjedten alkalmazzák a cirkulációs refluxot. Ez azt jelenti, hogy valamely tányérról a folyadék egy részét elvezetik, az oszlopon kívül lehűtik, és néhány tányérral magasabban visszavezetik az oszlopba. Ilyen esetek számítására természetes utnak kínálkozik, hogy a visszatáplálást mint önálló betáplálást fogjuk fel, melynek összetétele megegyezik az elvételenek az előző iterációban számított összetételével



/kiindulásként előzetesen fel kell venni valamilyen becsült összetételt/. Ha a számítás végén két egymást követő iterációban az elvételi összetételek közötti különbség kicsinnyé válik, akkor az elkövetett hiba is kicsi lesz.

Korrekciós algoritmusunk azonban lehetővé teszi a cirkulációs refluxok jobb közelítéssel történő számítását. Ha az elvétel a  $p$ -edik tányérról van, a visszatáplálás pedig a  $q$ -adikra történik, akkor a  $q$ -edik tányérra felírt komponensmérleg egyenlet a következőképpen alakul:

$$L_{q-1}x_{q-1,j} - [L_q + U_q + (V_q + W_q)k_{q,j}]x_{q,j} + V_{q+1}k_{q+1,j}x_{q+1,j} - R_q x_{p,j} = F_q z_{q,j} \quad /5.18/$$

és a /4.3/ egyenletrendszer  $q$ -edik sorában a  $p$ -edik oszlopban megjelenik egy  $g_{q,j}$  együttható. /Ebben az esetben természetesen a cirkulációs reflux a  $p$ -edik tányéron szerepel az  $U_p$  folyadékfázisbeli oldalelvételben, de  $F_q$ -ban betáplálásként nem/. Az egyenletrendszer a /4.4/ képletek csekély módosításával megoldható és a számítási időigény továbbra is  $m \times n$ -nel marad arányos.

A /4.9/ korrekciós egyenletrendszer felírásánál feltételezzük, hogy a  $\Delta x_{p,j}$  korrekciók arányosak lesznek  $x_{p,j}$ -vel. Így a /4.11/ egyenletrendszer jobb oldalára egy konstans kerül, illetve az

[5.1/ egyenletrendszer jobboldalához egy olyan konstans vektort kell hozzáadni, amelynek csak a  $q$ -adik sorában van nem-zérus elem, ami a megoldás menetét lényegesen nem befolyásolja, legfőképpen annak időszükségletét nem növeli lényegesen. Ezzel a számításmenettel a cirkulációs refluxok összetétele sokkal gyorsabban konvergál a helyes értékhez, csökkentve az egész számításához szükséges iterációk számát.

## 6. A PROGRAMOK ÉS AZ ELVÉGZETT SZÁMITÁSOK ISMERTE- TÉSE

### 6.1. A számítógépi programok

A kidolgozott új módszer kipróbálására, a különböző változatok összehasonlítására, ellenőrzésére és helyességük igazolására a következő számítógépi programokat készítettük el:

a/ A Wang-Henke-módszer programja totál- és parciális kondenzátorra, mint összehasonlítási alap,

b/ A 4. fejezetben ismertetett módszer programja totál- és parciális kondenzátorra,

c/ A független változó 5.2.1. szerinti transzformációjára épülő program,

d/ Lépéshossz rövidítést is megvalósító program,

e/ A cirkulációs reflux számításának az 5.2.3. szerinti javítását megvalósító program,

f/ A c/ és e/ kombinációja.



A programokat a Magyar Vegyipari Egyesülés GIER típusu számítógépére készítettük el, ALGOL 4 programnyelven. Az egyes programokat igyekeztünk egységes alapelvek szerint elkészíteni, elsősorban az egységes adatszolgáltatást biztosítani.

A szükséges kiindulási adatok a következők:

a/ a kolonna elrendezésére vonatkozó adatok:

tányérszám,  
betáplálások száma és helye,  
folyadékfázisu oldalelvételek száma és helye,  
gőzfázisu oldalelvételek száma és helye,  
cirkulációs refluxok száma, az elvétel és visszatáplálás helye,

b/ a működésre vonatkozó adatok:

a komponensek száma,  
a betáplálások mennyisége, hőmérséklete és összetétele,  
fejtermék mennyisége és halmazállapota,  
fejreflux mennyisége,  
oldalelvételek mennyisége,  
cirkulációs refluxok mennyisége és visszatérő hőmérséklete,

c/ a komponensek fizikai tulajdonságai:

az egyensúlyi állandók értéke két hőmérsékleten,  
fajlagos entalpiák folyadék- és gőzállapotban két-két hőmérsékleten,

d/ iterációs kezdőértékek:  
tányérhőmérsékletek,  
cirkulációs refluxok összetétele,

A folyadék-, illetve gőzáramprofil kezdő értékét a program, állandó moláris átfolyást feltételezve, maga számítja ki. A 6. feladathoz sorozatszámításra alkalmas változatot készítettünk, az egyes számítások között csak a refluxarányt változtatva, kiindulási adatként - némi módosítással - az előző számítás eredményét használva fel.

A konvergenciát a következő hibafüggvényekkel mértük:

$$E_1 = \frac{1}{n} \sum_i |1 - \sum_j x_{i,j}| \quad /6.1/$$

$$E_2 = \frac{1}{n} \sum_i \left| \frac{L_i^{(r)} - L_i^{(r-1)}}{L_i^{(r)}} \right| \quad /6.2/$$

$$E_3 = \frac{1}{m} \sum_j \left| x_{cirk,j}^{(el)} - x_{cirk,j}^{(vissza)} \right| \quad /6.3/$$

Szavakban kifejezve, az első típusu hiba jellemző a móltörtek összegének 1-től való eltérésére, a második a folyadékáram profil változására a r-1 és r-edik iteráció között, míg a harmadik a cirkulációs refluxoknál az elvétel és visszatáplálás közötti összetétel eltérése. A megoldásnál elvben mindhárom hibának zérusnak kell lennie, számításainkat akkor tekintettük kellően pontosnak, ha

$E_1 < 10^{-4}$  teljesült. Tapasztalataink szerint ekkorra a többi hiba is erre a nagyságrendre csökkent. A számítást úgy végeztük, hogy a hőmérséklet korrekciója után ismét anyagmérleget számítottunk és ekkor is kiszámítottuk az első típusu hibát,  $E'_1$ -et. Ez a gyakorlatban nem feltétlenül szükséges lépés, a módszer kidolgozása során azonban segítséget nyújtott a hibaösszetevők különválasztására. Végeztünk - demonstrációs és elemzési céllal - néhány olyan számítást is, ahol a tányérhőmérsékletekhez a számított korrekciót tíz részletben adtuk hozzá és így követtük nyomon a hiba csökkenését [8. ábra/.

Eredményként a program minden iterációban kiírja:

- a tányérhőmérsékletek korrekcióját,
- az új tányérhőmérsékleteket,
- a folyadék- és gőzáramprofilt,
- a móltörtek összegének egytől való eltérését minden tányéron korrekció előtt és után,
- a normált móltörteket minden tányéron,
- az  $E_1$ ,  $E'_1$ ,  $E_2$  és, ha van,  $E_3$  értékeket.

## 6.2. Az elvégzett számítások

Hat különböző adatrendszerrel végeztünk számításokat. Az első adatrendszer egyszerű mintafeladat volt, a program valamennyi részének kipróbálására. Két, az irodalomban több különböző módszerrel megoldott [1] , [14] , [22] , [37] feladatot dolgoztunk ki a második és harmadik példában.



Az előbbi 5 komponensű könnyű szénhidrogén elválasztására szolgáló 16-tányéros egyszerű oszlop volt, míg az utóbbinál az oszlop két betáplálással és két oldalelvétellel /folyadék-, illetve gőzfázisban/ rendelkezett. A betáplálás 11 komponensű könnyű szénhidrogén elegy volt. A negyedik feladatban egy magyarországi nyersolaj desztilláló oszlop tényleges elrendezését modelleztük /egy betáplálás, három oldalelvétel, két cirkulációs reflux/, betáplálásként a harmadik példa 11 komponensű elegyét vettük. Így e fiktív betáplálás miatt az eredményekből vegyészmérnöki következtetések nem vonhatók le, célunk csak annak bizonyítása volt, hogy az új módszer még ilyen bonyolult oszlop modellezésére is hatékonyan működik. Az ötödik és hatodik feladatban mind a kolonna elrendezésére, mind a működésére vonatkozó adatok tényleges, magyarországi ipari adatok voltak. Az előbbi esetben a cél ismét annak bizonyítása volt, hogy a módszer nehéz körülmények között /a dusító szakasz nélküli kiforráló oszlop nehéz feladatot jelent/ is kifogástalanul működik.

Az utolsó példánk egy propán-bután torony tervezése volt, Itt igyekeztünk bemutatni, hogy módszerünk milyen segítséget tud nyújtani a vegyészmérnököknek egy ilyen feladat megoldásánál.

Az 1.-4. feladatokban az egyensulyi állandók számításához kiindulási adatként a Lyster [22] által közölt adatokat használtuk fel olyan formában, hogy az általa adott  $k(T)$  függvények értékeit 25-145 °C között 10 °C-onként kiszámítottuk, majd az így nyert pontokon át  $\ln k - 1/T_{\text{abs}}$  koordináta-rendszerben regresszióval egyenest fektettünk a /2.4/ függvény állandóinak meghatározására. A kapott állandókat az 1. táblázat tartalmazza.

A kiindulási adatok és eredmények összefoglalva az 1.-8. táblázatokban és a 3-10. ábrán láthatók.



## 7. AZ EREDMÉNYEK ÉRTÉKELÉSE

Az eredmények értékeléséhez összehasonlítási alapként az irodalomból a Wang-Henke-módszert választottuk, a következő indokok alapján: a  $\theta$  módszer - és különböző változatai- biztonságosság szempontjából semmiképpen nem felelnek meg, a biztosan konvergens dinamikus modelleknek viszont a konvergenciája lényegesen lassabb. Ismertek próbálkozások a miénkhez hasonló, Newton-Raphson-típusú iterációk megvalósítására, ezek azonban vagy  $2n$  ismeretlenes lineáris egyenletrendszerre vezetnek, amelyek megoldásának munkaidő-szükséglete mintegy nyolcszorosa a miénknek, vagy még rosszabb esetben véges differenciákon keresztül közelítőleg számítják a parciális deriváltakat, amelynél egy iteráció legalább  $n+1$  Wang-Henke-félelvel egyenértékű, és így azzal nem lehet versenyképes. Végül történtek kísérletek a Wang-Henke-módszer javítására a várható hőmérsékletprofil előrebecslésével. Ezek viszont elméletileg teljesen megalapozatlanok és így néhány kedvező eredmény közlését kritikává kell fogadni. Összefoglalva, a Wang-Henke-módszerrel történő összehasonlítást tartjuk a legjobb értékmérőnek.

A hat mintafeladat megoldása az új módszer biztonságos voltát egyértelműen bizonyítja. A konvergencia gyorsasága szempontjából való összehasonlítás, a mellékelt táblázatok és diagramok tanúsága szerint, szintén az új módszer előnyös voltát bizonyítja.



Meg kell említeni, hogy nem volt célunk a szükséges gépidő mindenáron való csökkentése. Ezért módszerünk rutinszerű felhasználás esetére további tartalékokkal rendelkezik. Így pl. a hőmérsékletkorrekció utáni második anyagmérleg számításra nincs szükség. A kidolgozás során szigorubb pontossági követelményt irtunk elő, mint amilyenre a gyakorlatban szükség van. A számítás végén nem kell a korrekciós egyenleteket minden iterációban újból felírni, hanem, jó szervezés esetén, fel lehet használni az előző iterációban már megoldott egyenletrendszert.

Az új módszer legnagyobb előnyének ezért nem azt tartjuk, hogy gépidőigénye mintegy fele a Wang-Henke-félének, hanem ami ennél fontosabb, azt, hogy a szükséges iterációk száma szinte teljesen független a probléma méretétől és a kiindulási adatoktól. Az ötödik feladatot kivéve egy új feladat megoldása általában 5-7 iterációt igényelt, míg sorozatszámításnál a megoldás közeléből kiindulva 3-5 iterációra volt szükség. E tekintetben az irodalomban található minden módszer sokkal nagyobb bizonytalanságot mutat.

Külön kell vizsgálni a hatodik feladat eredményét. Itt ugyanis nemcsak azt a célt tűztük magunk elé, hogy megkapjuk egy probléma matematikai megoldását, hanem azt is igyekeztünk bemutatni, hogy hogyan lehet az általunk kidolgozott eszközt a gyakorlatban használni, milyen segítséget tud

egy ilyen számítás nyújtani a vegyészmérnöknek. A feladat egy propán-bután kolonna tervezése volt, ahol a fejtermékben a nehezebb komponensek mennyisége nem haladhatta meg az 1 %-ot.

A számítások során változtattuk az elméleti tányérszámot, a refluxarányt és a fejtermék mennyiségét. Az eredményekből látható, hogy van egy olyan közepes tányérszám érték /18 tányér/, amely-nél az eredmény, vagyis a fejtermék pentántartalma, erősen függ a működési körülményektől. Ennél magasabb tányérszámoknál /22-26/ egy minimális refluxarány felett a kívánt cél biztonságosan elérhető, míg kis tányérszámok esetén /10-14/ még a magas refluxarány sem biztosít kellően tiszta terméket. A desztillátum mennyiségének csökkentésére a 18 tányéros oszlop érzékenyen reagál, míg a 10 tányér esetén ezzel sem lehet a kívánt tisztaságot elérni.

Tudásunk jelenlegi színvonalán egy ilyen oszlop tervezése nem lehet kizárólag számítógépi rutinfeladat. Az egymásnak ellentmondó tényezőknek /tányérszám, refluxarány, desztillátum mennyiség/ különböző műszaki és gazdasági hatásai vannak. Ezek elemzése és a döntés a vegyészmérnök feladata. Amiben a számítógép segítséget tud nyújtani, az a különböző tényezők hatásának megismerése, érzékenységvizsgálat, a lehetséges alternatívák kijelölése, és nem utolsósorban alapadatok szolgáltatása az oszlophoz kapcsolódó egyéb műveleti egységek számításához.



Ez utóbbi gondolathoz kapcsolódva külön ki kell emelni a hőmérleg jelentőségét. A folyadék- és gőzáramok, valamint a fej- és fenékhőmérséklet ismeretében megadható a visszaforralóban, illetve a kondenzátorban átadandó, illetve elvonandó hőmennyiség, ebből számítható a szükséges fűtő-, illetve hűtőfelület, stb.

Nem célunk rektifikáló oszlopok tervezési és üzemeltetési problémáinak részletes tárgyalása, e gondolatmenettel csupán be akartuk mutatni a matematikai modellezés és a vegyészmérnöki - elsősorban tervezői - munka sokrétű kapcsolatát.

Rátérve az új módszer különböző változatainak összehasonlítására, a 4.3.2. pontban bebizonyítottuk, hogy a konvergenciának - bizonyos feltételek mellett - elégséges feltétele a lépéshossz megfelelő rövidítése. A gyakorlatban mindössze egyetlen feladat egyetlen lépésében tapasztaltuk, hogy a korrekció után  $E_1'$  hiba nagyobb volt, mint  $E_1$ , a korrekció előtti hiba. Erre az esetre alkalmaztuk lépéshosszrövidítő algoritmusunkat.

Bár használatával abban a lépésben valóban az  $E_1$  hiba csökkenését lehetett elérni, végeredményben a szükséges iterációk száma növekedett. Így azt a következtetést vontuk le, hogy a lépéshossz rövidítést csak ott célszerű alkalmazni, ahol a módszer nélküle, az egész számítást tekintve, divergens volna.



Teljes mértékben sikeresnek bizonyult a cirkulációs refluxok számításának javítására tett lépés.

A független változó /5.16/ szerinti transzformációja nem hozott lényeges javulást, amiből azt a következtetést kell levonni, hogy az egyenletrendszer nem-lineáris voltaért - és így a korrekció utáni maradék-hibáért - elsősorban nem a  $k(T)$  függvények nemlinearitása a felelős.

Befejezésül néhány szót a módszer továbbfejlesztésének lehetőségéről. Az /5.16/ transzformáció sikertelenségéből, és az  $E_1$  és  $E_2$  hibák közel párhuzamos lefutásából az a gondolat adódik, hogy a konvergencia szempontjából a hőmérlegnek, illetve az  $L_1$  folyadékarámpofil változásának van "sebeségmeghatározó" szerepe. További lényeges javulást tehát úgy lehetne elérni, ha a  $\Delta T$  hőmérsékletkorrekciók számításánál ezt eleve figyelembe lehetne venni, de mindenképpen elkerülve a  $2n$  ismeretlenes lineáris egyenletrendszer fellépését.

## JELÖLÉSEK

a	}	a /4.2/ egyenlettel definiált együttthatók
b		
c		
d		
D		desztillátum anyagárama (mól/sec)
F		belépő anyagáram (mól/sec)
H		fajlagos entalpia (cal/mól)
k	}	gőz-folyadék egyensúlyi állandó
k <sup>(1)</sup>		gőz-folyadék egyensúlyi állandó hőmérséklet- függésének konstansai
k <sup>(2)</sup>		
L		folyadékáram az oszlopban (mól/sec)
m		komponensek száma
n		tányérok száma
P		nyomás
p		a /4.4/, illetve /5.2/ egyenlettel definiált segédváltozó
q		a /4.4/, illetve /5.4/ egyenlettel definiált segédváltozó
R		cirkulációs reflux anyagáram (mól/idő)
r	}	az /5.2/ egyenlettel definiált segédváltozók
s		
t		
S		a móltörtek összege
ΔS		a móltörtek összegének korrekciója
T		hőmérséklet (C°)
ΔT		hőmérsékletkorrekció (C°)
T <sub>abs</sub>		abszolút hőmérséklet (K°)
U		folyadékfelvétel (mól/sec)
V		gőzáram az oszlopban (mól/sec)
w		az /5.3/ egyenlettel definiált segédváltozó
W		gőzfelvétel (mól/sec)
x		móltört a folyadékfázisban
y		móltört a gőzfázisban
z		móltört a betáplálásban

$\beta$	a /4.12/ egyenlettel definiált együttható
$\gamma$	a /4.13/ egyenlettel definiált együttható
$\lambda$	lépéshossz-csökkentő tényező
$\rho$	az /5.8/ egyenlettel definiált együttható
$\nu$	gőzarány a folyadékfázisban
$\phi$	a /4.33/ egyenlettel definiált függvény

#### Indexek

B	betáplálás
i	tányér-index ( $i=1,2,\dots,n$ )
j	komponens-index ( $j=1,2,\dots,m$ )
L	folyadékfázis
V	gőzfázis
szám	számított
kor	korrigált
cirk	cirkulációs reflux

#### Felső index

t	t-edik időpillanat
r	iteráció száma
(el)	cirkulációs reflux elvétel
(vissza)	cirkulációs reflux visszatáplálás
0	alappont



# I R O D A L O M

- [1] Amundson, N.R., Pontinen, A.J.:  
Ind. Eng. Chem.  
50 /1958/ 730.
- [2] Amundson, N.R., Pontinen, A.J., Tierney, J.W.:  
AIChE J.  
5 /1959/ 295.
- [3] Ball, V.E.: Előadás. A.I.Ch.E. Meeting,  
New Orleans 1961.
- [4] Billingsley, D.S.:  
AIChE J.  
12 /1966/ 1134.
- [5] Billingsley, D.S.:  
AIChE J.  
16 /1970/ 441.
- [6] Billingsley, D.S., Boynton, G.W.:  
AIChE J.  
17 /1971/ 65.
- [7] Boynton, G.W.: Hydr. Proc.  
49 /1970/ 153.
- [8] Brusset, H., Depeyre, D.:  
Előadás. Usti nad Labem, 1972.
- [9] Friday, J.R., Smith, B.D.:  
AIChE J.  
10 /1964/ 698.

- [10] Gentoy, J.W.: Can J. Chem. Eng.  
48 /1970/ 451.
- [11] Girard, M.B.: Chimie et Industrie  
100 /1968/ 666.
- [12] Greenstadt, J.L. et.al.:  
Ind. Eng. Chem.  
50 /1958/ 1644.
- [13] Holland, C.D.:  
Multicomponent Distillation  
Prentice Hall Inc. New York, 1963.
- [14] Houtby, D.K., Khan, A.U.:  
Ind. Eng. Chem. Symp. Ser. no. 35.  
/1972/ 3:3
- [15] Jelinek, J., Hlavacek, V., Kubicek, M.:  
Ind. Eng. Chem. Symp.  
Ser. no. 35. /1972/ 3:9
- [16] Jelinek, J., Hlavacek, V., Kubicek, M.:  
Előadás. Usti nad Labem 1972.
- [17] Jelinek, J., Hlavacek, V., Kubicek, M.:  
Előadás. CHISA kongresszus  
Prága 1972.
- [18] Lee, E.S.: AIChE J.  
16 /1970/ 679.

- [19] Lee, E.S., Noh, J.C.:  
AIChE J.  
17 /1971/ 1277.
- [20] Lewis, W.K., Matheson, G.L.:  
Ind. Eng. Chem.  
24 /1932/ 494.
- [21] Lutovsky, Z., Merl, I.:  
Előadás. CHISA Kongresszus,  
Prága, 1972.
- [22] Lyster, W.N., et. al.:  
Petr. Ref.  
38 No. 6. /1959/ 221.
- [23] Lyster, W.N., et. al.:  
Petr. Ref.  
38 No. 7. /1959/ 151.
- [24] Lyster, W.N., et. al.:  
Petr. Ref.  
38 No. 10. /1959/ 139.
- [25] Newman, J.S.: Hydr. Proc.  
42 /1963/ 141.
- [26] Noh, J.C., Lee, E.S.:  
AIChE J.  
17 /1971/ 886.



- [27] Orbach, O., et. al.:  
Chem. Eng. J.  
3 /1972/ 176.
- [28] Rose, A., et. al.:  
Ind. Eng. Chem.  
50 /1958/ 737.
- [29] Seppala, R.E., Luns, R.:  
Franklin Inst. J.  
293 /1972/ 325.
- [30] Stainthorp, F.P., Whitehouse, P.A.:  
Ind. Eng. Chem. Symp.  
Ser. No. 23. /1967/ 181.
- [31] Stainthorp, F.P., Whitehouse, P.A.:  
Ind. Eng. Chem. Symp.  
Ser. No. 23. /1967/ 189.
- [32] Thiele, E.W., Geddes, R.L.:  
Ind. Eng. Chem.  
25 /1933/ 289.
- [33] Tierney, J.W., Bruno, J.A.:  
AIChE J.  
13 /1967/ 556.
- [34] Tierney, J.W., Janosik, J.L.:  
AIChE J.  
15 /1969/ 897.

- [ 35 ] Tomich, J.F.: AIChE J.  
16 /1970/ 229.
- [ 36 ] Willadsen, J.:  
Report on six papers in session 3.  
Elmondva a "Decision, Design and  
the Computer" szimpóziumon,  
London, 1972.
- [ 37 ] Wang. J.C., Henke, G.E.:  
Hydr. Proc.  
45 /1966/ 155.

M E L L É K L E T E K





1. TÁBLÁZAT  
A  $k_j(T)$  függvények együtthatói.

Komponens	1.-4. feladat		5. feladat		6. feladat	
	$k^{(1)}$	$k^{(2)}$	$k^{(1)}$	$k^{(2)}$	$k^{(1)}$	$k^{(2)}$
metán	4,22	- 446	3,56	- 345	-	-
etán	4,30	-1001	5,47	-1349	4,51	- 938
propilén	4,22	-1258	-	-	-	-
propán	4,05	-1241	5,99	-1857	5,33	-1569
i-bután	4,30	-1548	-	-	5,70	-1927
n-bután	4,51	-1696	6,43	-2316	6,21	-2192
n-pentán	5,40	-2283	6,75	-2653	6,40	-2557
n-hexán	6,23	-2832	5,25	-2471	6,77	-2956
heptán	7,07	-3393	-	-	7,44	-3466
oktán	7,89	-3974	-	-	-	-
egyéb, $C_{8+}$	10,09	-5332	-	-	-	-

2. TÁBLÁZAT [1. rész]  
A kiindulási adatok.

A feladat sorszáma	1		2	3		4			5	6
tányérok száma	15		16	21		38			8	*
komponensek száma	5		5	11		11			6	7
betáplálás helye	7	9	8	7	13	34			2	*
betáplálás mennyisége	2,000	1,000	1,000	0,345	0,665	1,000			1,000	1,000
kondenzátor típusa	totál		parc	parc		totál			parc	totál
desztillátum mennyisége	1,000		0,225	0,230		0,125			0,142	-
reflux arány	2,500		6,85	3,12		5,00			0	*
oldalelvétel helye	4	13	-	4	16	14	22	28	-	-
oldalelvétel állapota	gőz	foly	-	gőz	foly	foly	foly	foly	-	-
oldalelvétel mennyisége	0,250	0,250	-	0,15	0,25	0,125	0,125	0,125	-	-
cirkulációs reflux elvétel helye	5		-	-		6	19		-	-
visszatáplálás helye	3		-	-		4	18		-	-
visszatáplálás mennyisége	0,500		-	-		0,250	0,250		-	-
lehűtés mértéke	40 C°		-	-		30 C°	30 C°		-	-

\* lásd 2. táblázat 2. része.



2. TÁBLÁZAT [2. rész]  
A 6. feladat kiindulási adatai.

Tányér- szám	betápl. helye	desztillátum mennyisége	r e f l u x   a r á n y									
			1,00	1,25	0,50	1,75	2,00	2,25	2,50	2,75	3,00	3,50
10	6	0,2887							+	+	+	
		0,2837							+		+	
		0,2787							+		+	
		0,2687							+		+	
		0,2587							+			
14	8	0,2887					+	+	+	+	+	+
18	10	0,2887		+	+	+	+	+	+			
		0,2837					+					
		0,2787	+	+	+	+	+					
		0,2687	+	+	+	+	+					
22	12	0,2887	+	+	+	+	+					

3. TÁBLÁZAT  
A betáplálások összetétele.

A komponensek neve	A feladat sorszáma	1	2	3	4	5	6	
metán	-	-	-	0,058	-	0,001	0,0894	-
etán	-	-	0,030	0,300	-	0,010	0,0779	0,0271
propilén	-	-	-	0,174	0,015	0,100	-	-
propán	0,150	0,100	0,200	0,338	0,107	0,100	0,1448	0,0978
i-bután	0,150	0,200	-	0,029	0,061	0,100	-	0,0546
n-bután	0,250	0,200	0,370	0,087	0,260	0,100	0,2359	0,1092
n-pentán	0,200	0,200	0,350	0,014	0,232	0,149	0,1950	0,1706
n-hexán	0,250	0,300	0,050	-	0,137	0,150	0,2570	0,1540
heptán	-	-	-	-	0,069	0,150	-	0,3867
oktán	-	-	-	-	0,066	0,100	-	-
egyéb, C <sub>8+</sub>	-	-	-	-	0,053	0,040	-	-

4. TÁBLÁZAT

Egy iteráció időigénye.

[perc/

A feladat sorszáma	1	2	3	4
Wang-Henke-módszer	0,35	0,35	0,72	1,6
Uj módszer	0,63	0,63	1,43	3,1
Uj módszer cirk.javitással	0,70	-	-	3,5



5. TÁBLÁZAT [1.rész/

A szükséges iterációk száma .

A feladat sorszáma	1	2	3	4	5
Wang-Henke-módszer [6.1/a program/	13	30	52	22	-
Uj módszer, [6.1/b program/	6	6	6	9	9
Független változó transzformációval [6.1/c program/	-	7	5	-	9
Lépéshossz rövidítéssel [6.1/d program/	-	8	-	-	-
Cirkulációs reflux számítás javítással, [6.1/e program/	-	-	-	6	-
Független változó transzformációja és cirkulációs reflux számítás javítása [6.1/f program/	-	-	-	5	-

5. TÁBLÁZAT (2. rész/

A szükséges iterációk száma a 6. feladat megoldásánál.

Tányér szám	Desztillátum	r e f l u x a r á n y									
		1,00	1,25	1,50	1,75	2,00	2,25	2,50	2,75	3,00	3,50
10	0,2887							④	3	3	
	0,2837							④		3	
	0,2787							④		3	
	0,2687							⑤		3	
	0,2587							⑤			
14	0,2887					⑤	3	3	3	3	3
18	0,2887		5	4	4	⑦	3	3		3	
	0,2837	5	5	4	3	⑦					
	0,2787	5	5	4		⑦					
	0,2687	5	5	4		⑧					
22	0,2887	5	5	4	4	⑦					

Megjegyzés: A bekarikázott számok új számítást jelentenek, a be nem karikázottaknál a kiindulási adatokat ugyanazon sor korábbi eredményéből számítottuk.

6. TÁBLÁZAT /1. rész/

Az  $E_1$  hibák alakulása [ $E_1 \times 10^6$ ] a Wang-Henke-módszernél [6.1/a program/.

Iteráció sorszáma	2. ADATRENDSZER	3. ADATRENDSZER	4. ADATRENDSZER
1.	204218	710705	161567
5.	12574	45950	31251
10.	10467	13351	10510
15.	9321	6060	1409
20.	8465	3233	158
25.		1837	
30.		1078	
35.		645	
40.		389	
45.		237	
50.		145	



6. TÁBLÁZAT /2. rész/

A hibák alakulása az 1. feladat megoldásánál. / $E \times 10^6$ /.

ITERÁCIÓ sorsz.	6.1/a program		6.1/b program	
	$E_1$	$E_2$	$E_1$	$E'_1$
1.	307605	34473	128145	13696
2.	93575	24128	22403	451
3.	33539	7288	8273	65
4.	19032	5463	1008	1
5.	10447	3898	252	0
6.	5536	2338	48	0
7.	2920	1230		
8.	1570	665		
9.	842	359		
10.	451	194		
11.	241	104		
12.	129	56		
13.	69	30		

A hibák alakulása a 2. feladat megoldásánál  $/E \times 10^6/$ .

ITERÁCIÓ SORSZ.	6.1/b program			6.1/c program			6.1/d program		
	$E_1$	$E'_1$	$E_2$	$E_1$	$E'_1$	$E_2$	$E_1$	$E'_1$	$E_2$
1.	204218	81626	88357	204218	81626	88357	204218	81626	88357
2.	106188	193503	55007	106188	260173	61415	106188	90254	13466
3.	195072	33079	24654	261072	56987	23225	90937	80678	11925
4.	34526	2500	5448	57793	6878	8728	81071	67526	15505
5.	2270	12	574	7061	165	1770	68386	21521	24827
6.	36	0	18	134	0	47	24504	3014	5175
7.				4	0	1	1696	6	481
8.							52	0	27

6. TÁBLÁZAT /4. rész/

A hibák alakulása a 3. feladat megoldásánál  $[E \times 10^6]$ .

ITERÁCIÓ SORSZ.	6.1/b program			6.1/c program		
	$E_1$	$E'_1$	$E_2$	$E_1$	$E'_1$	$E_2$
1.	599561	202416	129942	599561	202416	129942
2.	219567	70918	50561	219567	82134	53896
3.	86782	10103	9832	98783	10368	12806
4.	8142	119	2041	8370	228	2578
5.	139	0	76	95	0	51
6.	16	0	3			



6. TÁBLÁZAT /5. rész/  
A hibák alakulása a 4. feladat megoldásánál /E x 10<sup>6</sup>/.

ITERÁCIÓ SORSZ.	6.1/b program			6.1/e program			6.1/f program		
	E <sub>1</sub>	E' <sub>1</sub>	E <sub>2</sub>	E <sub>1</sub>	E' <sub>1</sub>	E <sub>2</sub>	E <sub>1</sub>	E' <sub>1</sub>	E <sub>2</sub>
1.	161567	17857	234612	242662	28496	189438	242662	28396	189438
2.	46810	27924	31970	72847	10792	27733	72847	8942	28766
3.	39303	2098	8908	16334	277	8615	16755	222	6333
4.	9637	114	3287	1757	4	716	1161	1	524
5.	2834	12	1019	301	0	74	203	0	56
6.	1117	2	394	42	0	15	29	0	11
7.	414	0	140						
8.	159	0	51						
9.	61	0	19						

6. TÁBLÁZAT /6. rész/

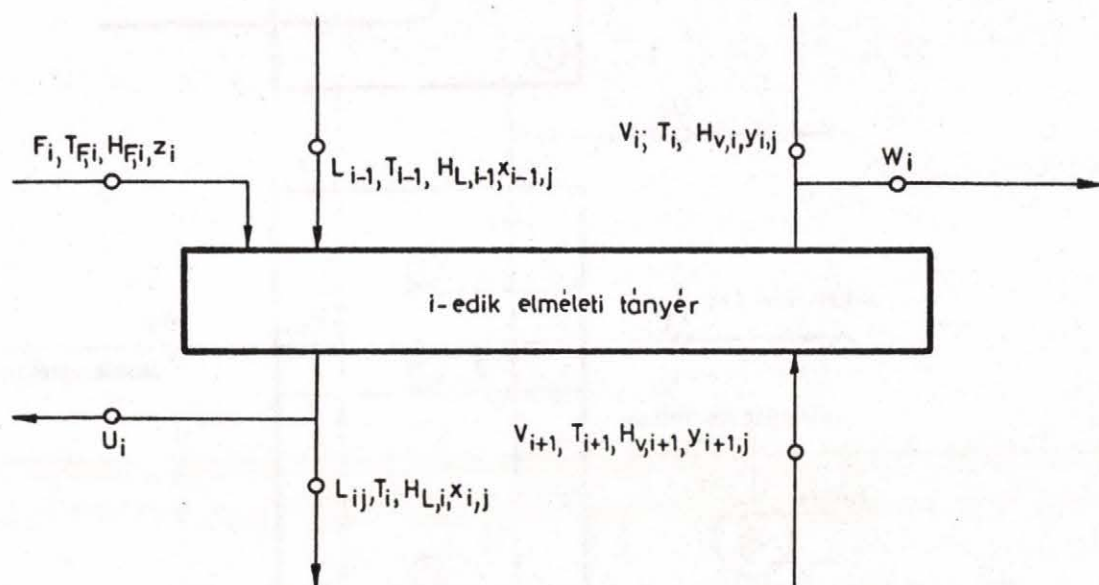
A hibák alakulása az 5. feladat megoldásánál  $/E \times 10^6/$ .

Iteráció sorszám	6.1/b program			6.1/c program		
	$E_1$	$E'_1$	$E_2$	$E_1$	$E'_1$	$E_2$
1	103035	19568	128935	103035	19568	128935
2	60352	5909	38627	60352	16377	48853
3	10568	175	8059	19134	866	13362
4	2812	28	3144	5783	116	5530
5	1134	4	1153	3002	14	2187
6	574	1	535	1024	3	747
7	195	0	180	494	0	390
8	120	0	93	151	0	120
9	28	0	27	71	0	52

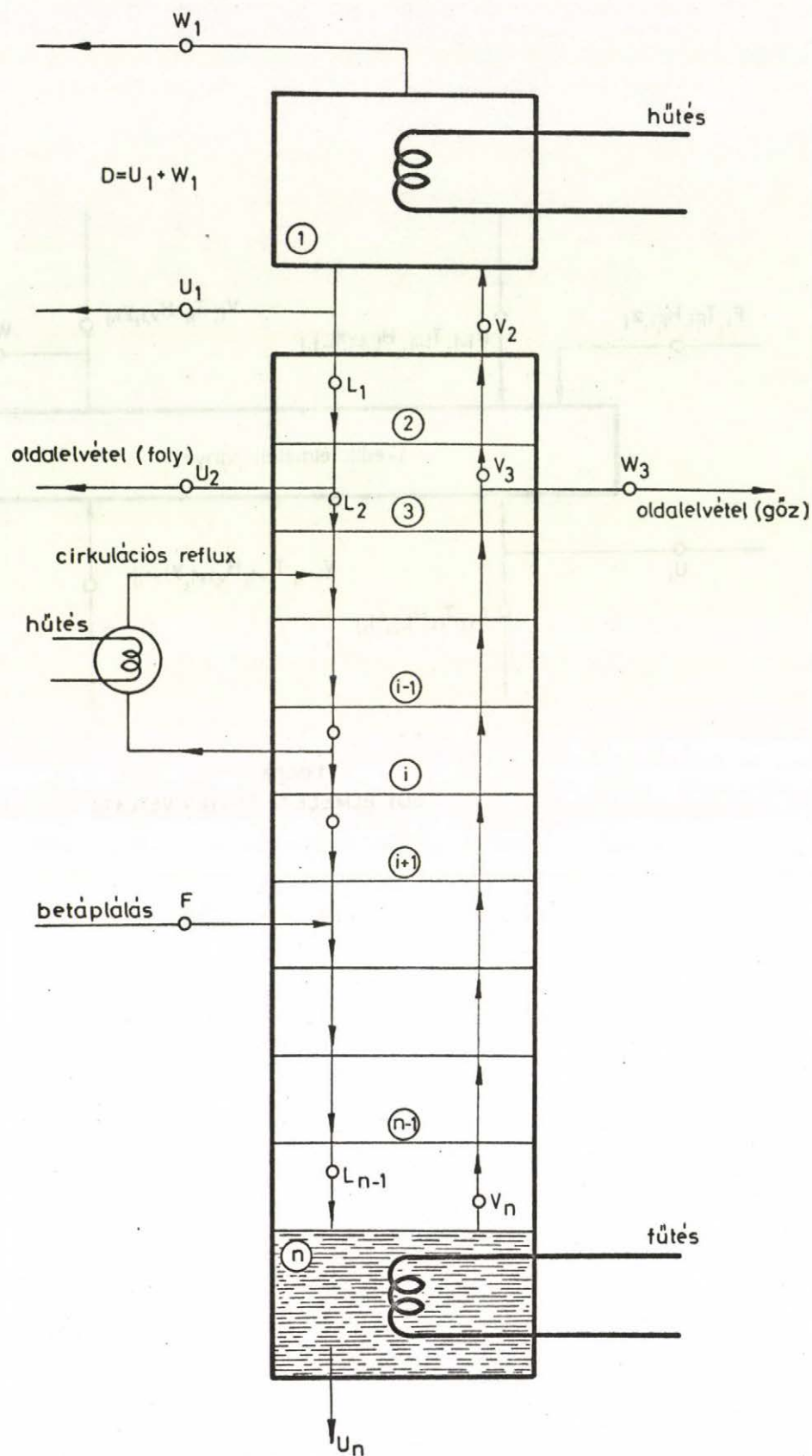
7. TÁBLÁZAT  
A. 6. feladat eredményei.  
A pentán móltörje a fejtermékben

tányérok száma	fejtermék mennyisége	r e f l u x   a r á n y									
		1,00	1,25	1,50	1,75	2,00	2,25	2,50	2,75	3,00	3,50
10	0,2887							0,041	0,038	0,036	
	0,2835							0,033		0,027	
	0,2737							0,026		0,021	
	0,2687							0,017		0,013	
	0,2587							0,012			
14	0,2887					0,020	0,017	0,015	0,013	0,012	0,010
18	0,2887	-	0,028	0,016	0,011	0,008	0,006	0,005		0,004	
	0,2837	0,0457	0,0202	0,0078	0,0030	0,0027					
	0,2787	0,0418	0,0149	0,0043		0,0010					
	0,2787	0,0357	0,0091	0,0024		0,0006					
22	0,2887	0,042	0,017	0,007	0,004	0,003					



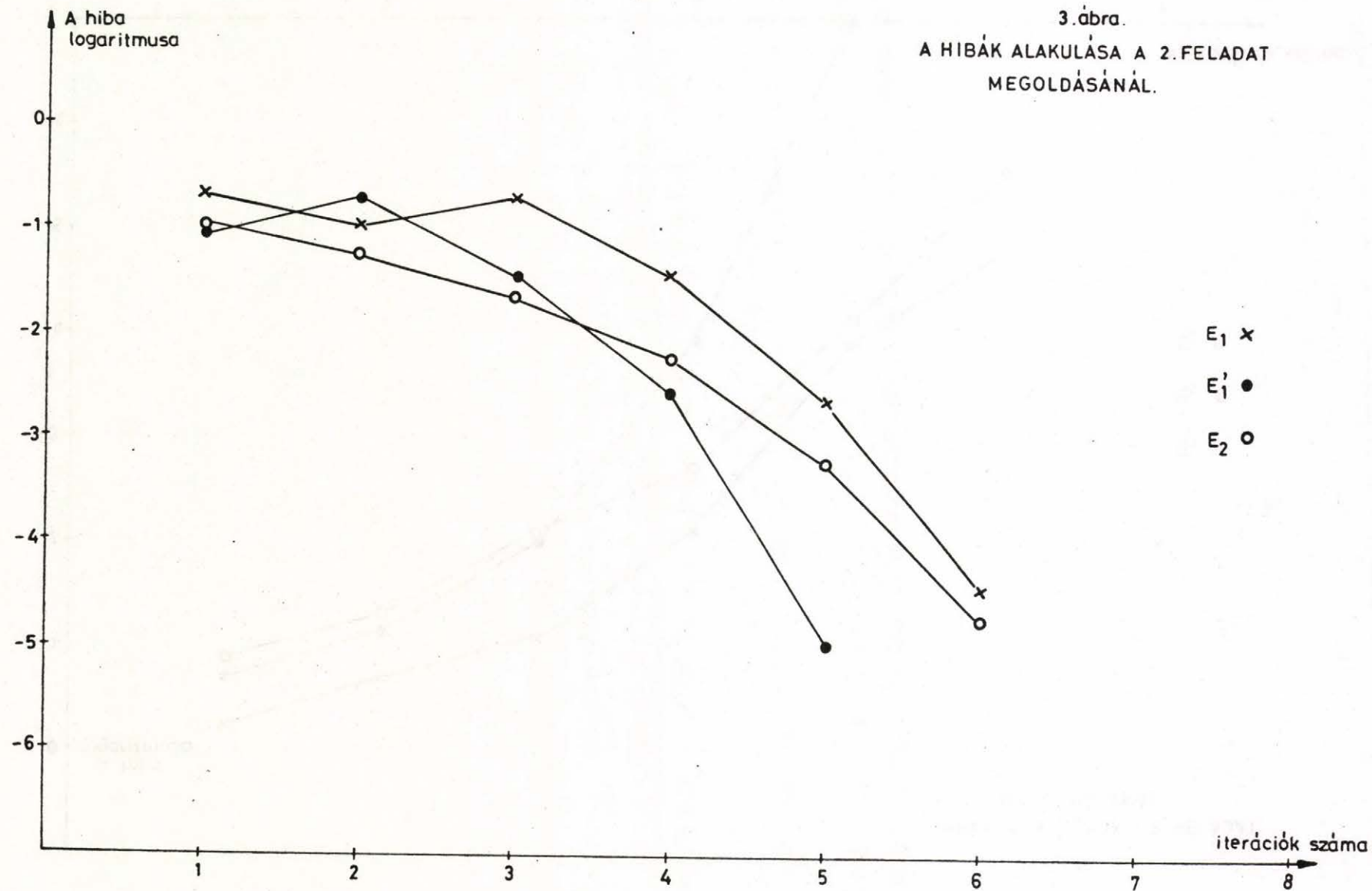


1. ábra.  
EGY ELMÉLETI TÁNYÉR VÁZLATA



2. ábra.  
BONYOLULT REKTIFIKÁLÓ OSZLOP  
VÁZLATA

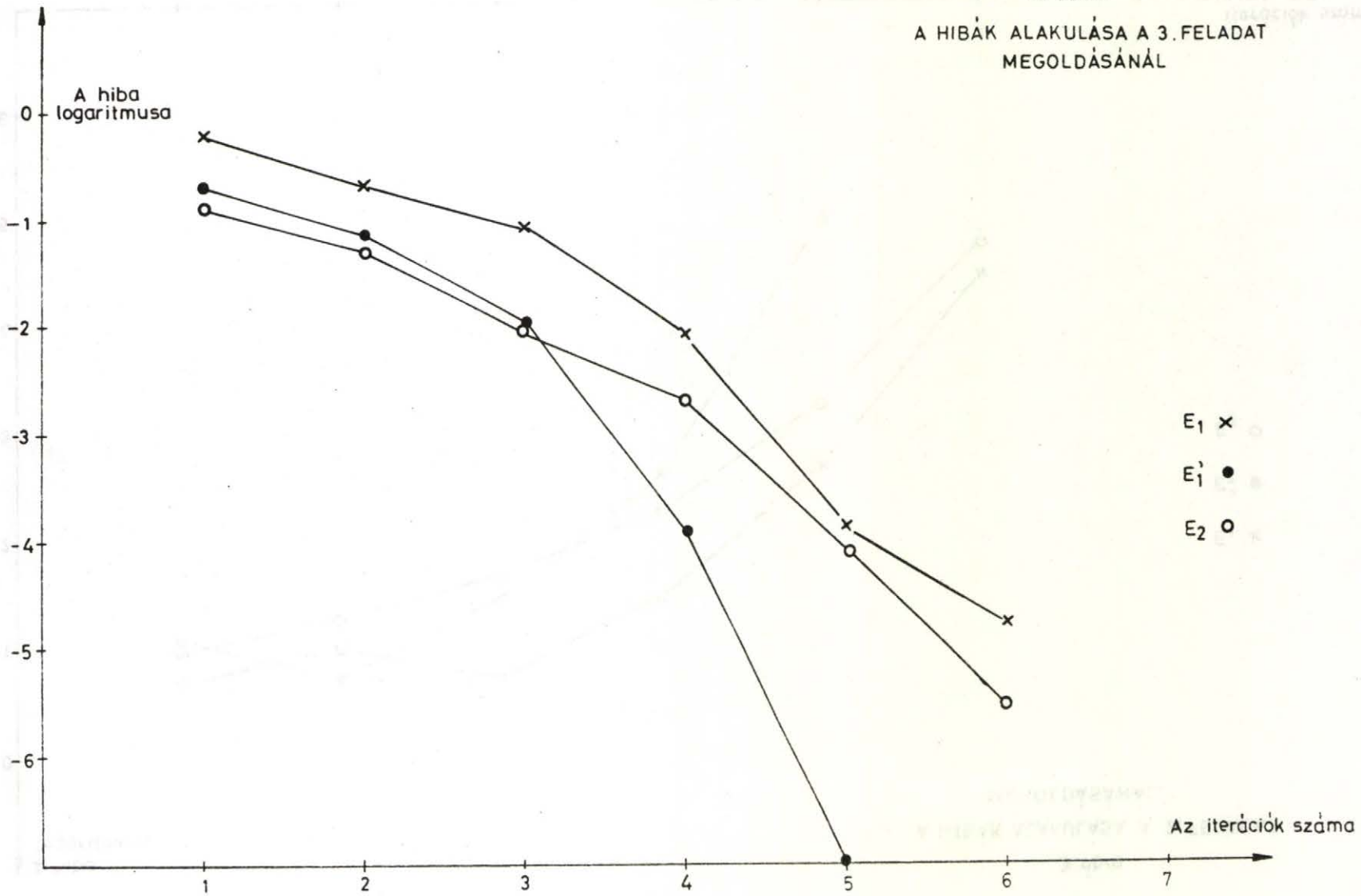
3. ábra.  
A HIBÁK ALAKULÁSA A 2. FELADAT  
MEGOLDÁSÁNÁL.



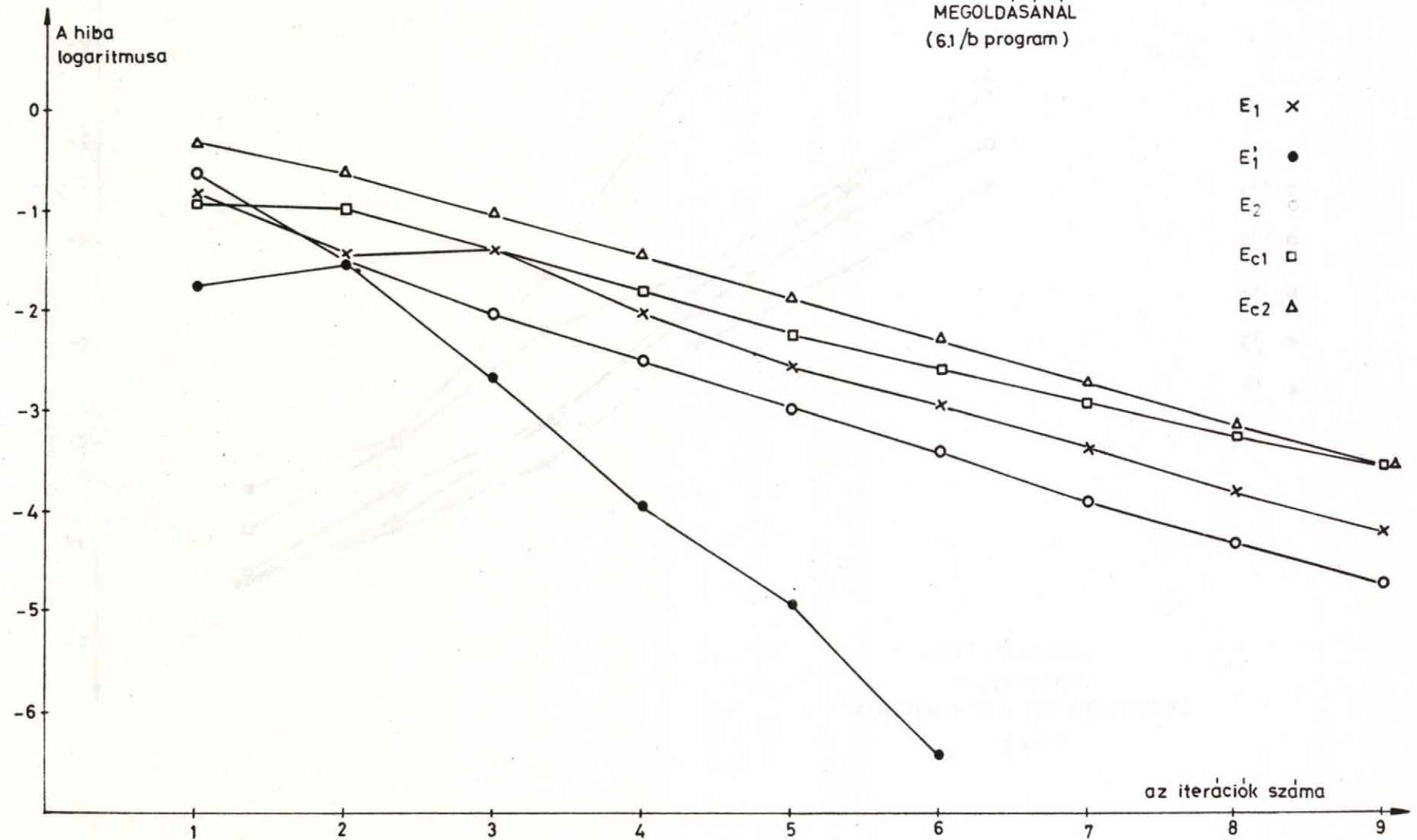


4. ábra.

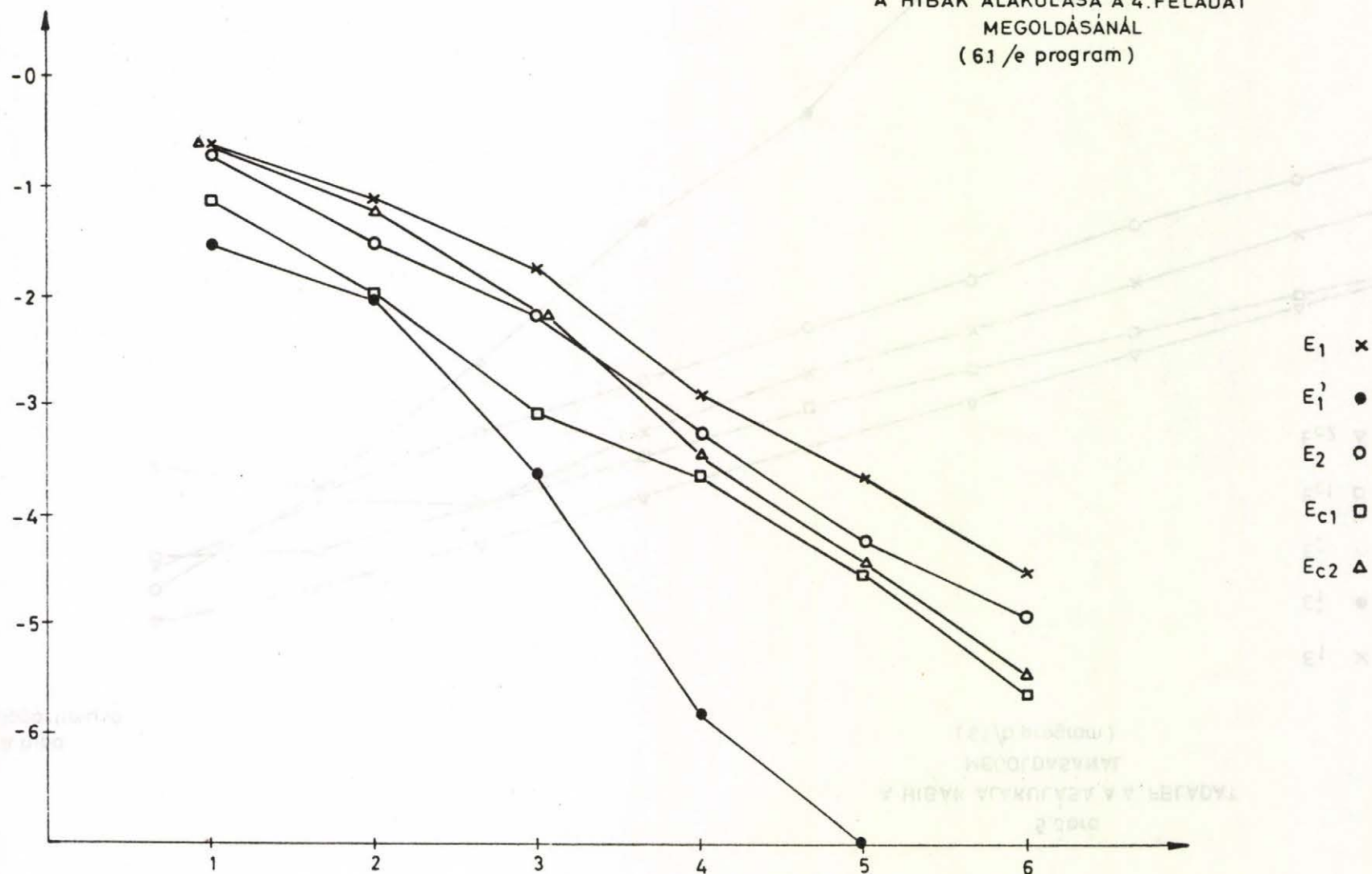
A HIBÁK ALAKULÁSA A 3. FELADAT  
MEGOLDÁSÁNÁL



5. ábra.  
A HIBÁK ALAKULÁSA A 4. FELADAT  
MEGOLDÁSÁNÁL  
(6.1/b program)



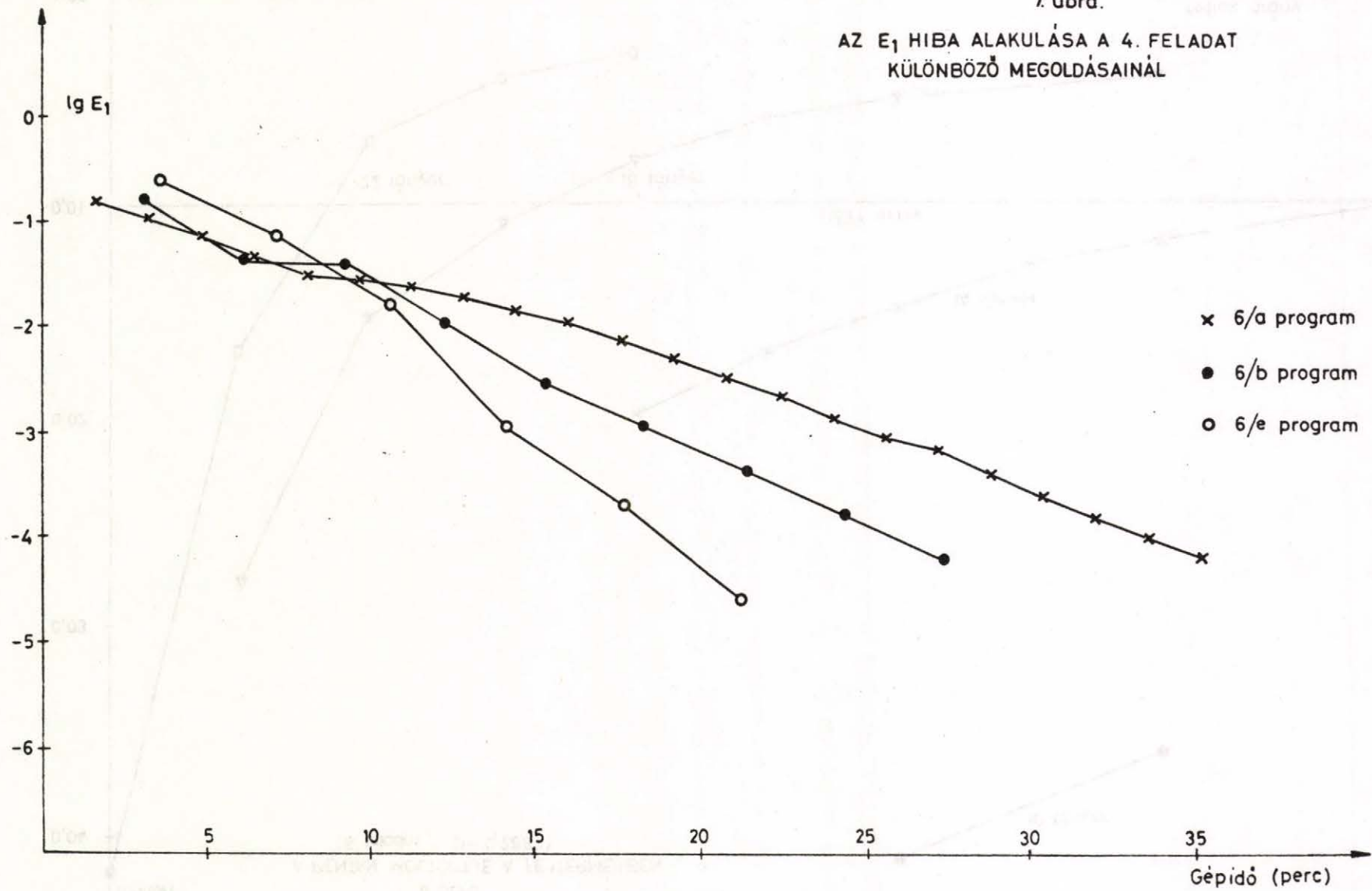
6. ábra.  
A HIBÁK ALAKULÁSA A 4. FELADAT  
MEGOLDÁSÁNÁL  
(61/e program)

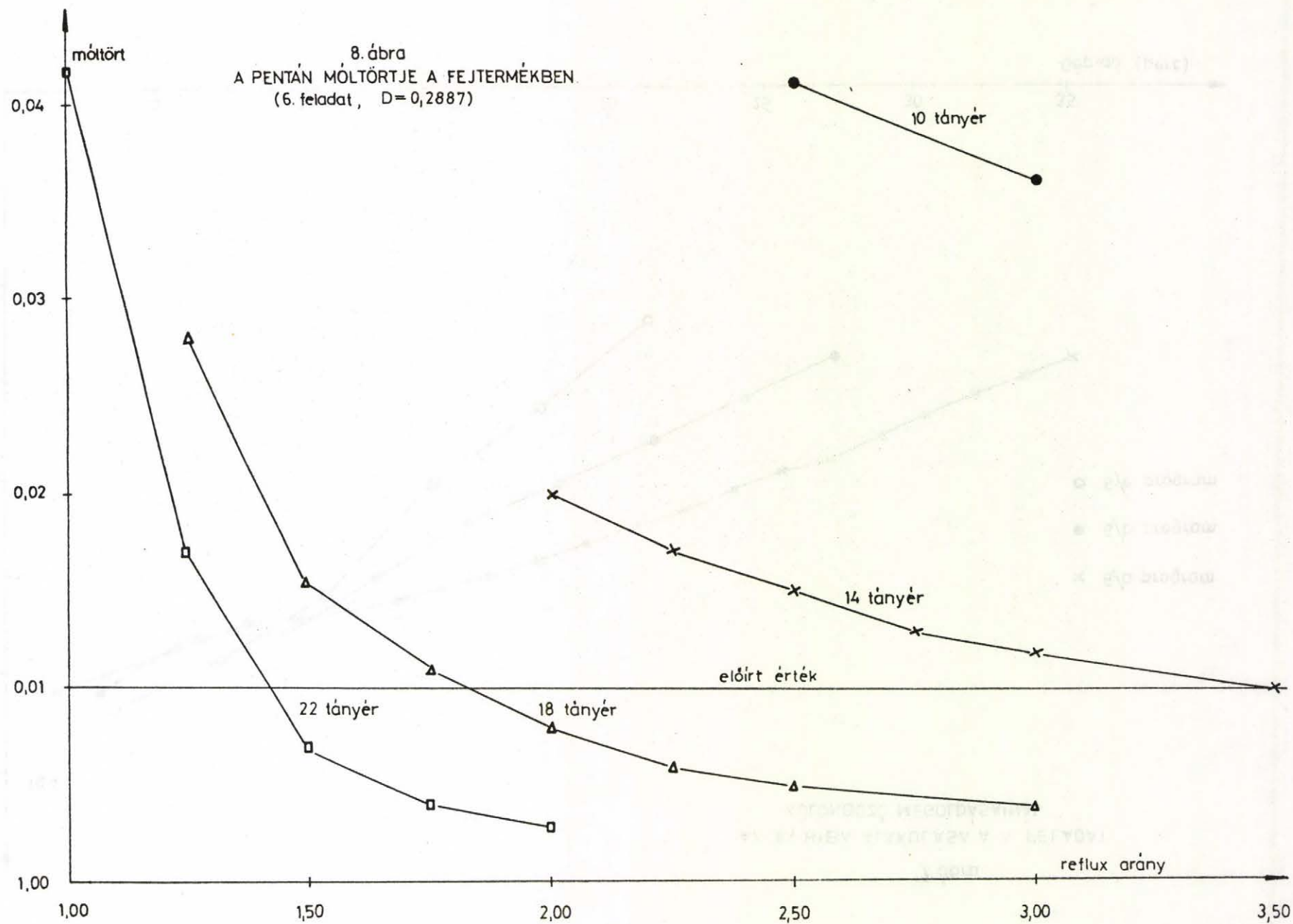




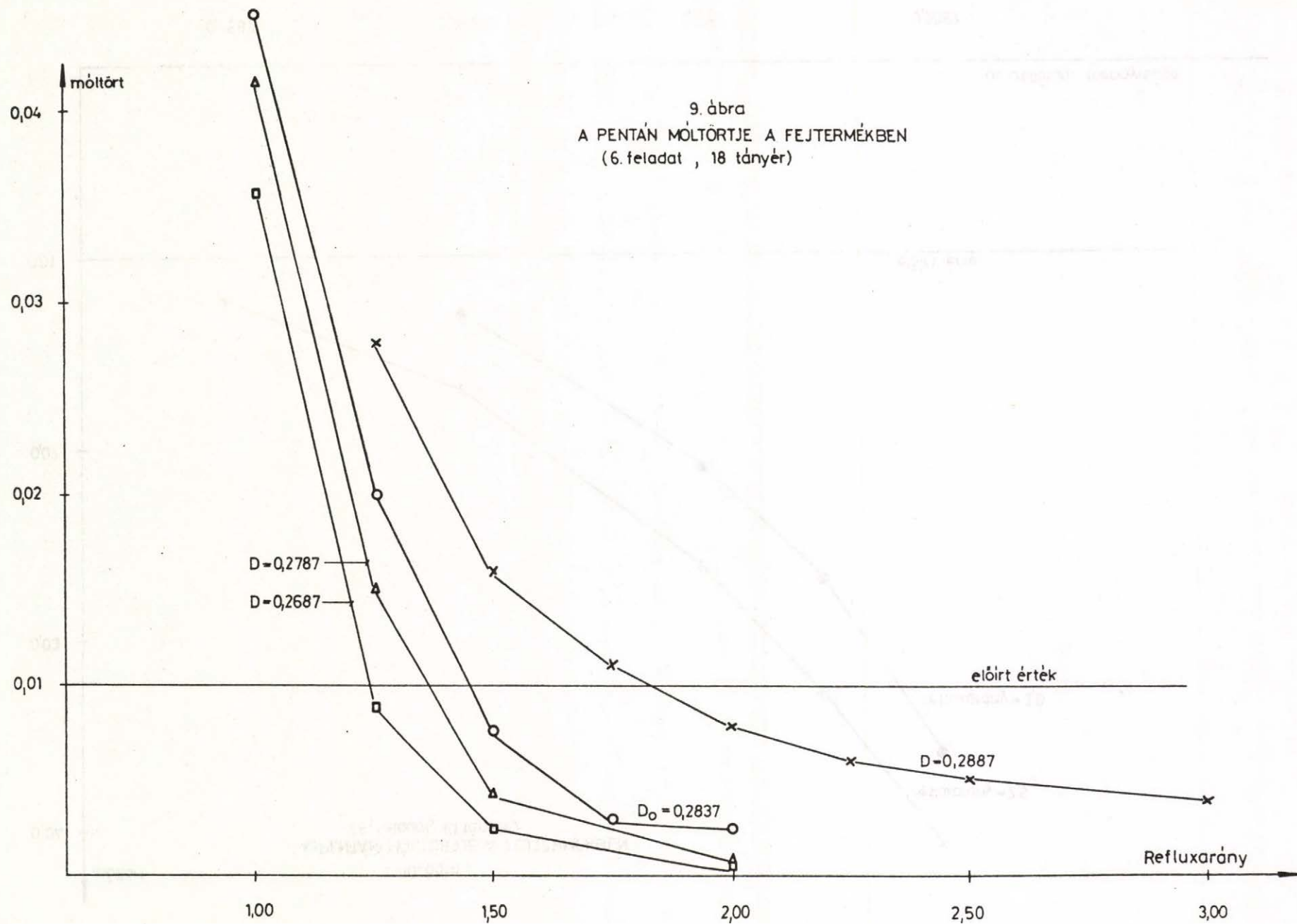
7. ábra.

AZ  $E_1$  HIBA ALAKULÁSA A 4. FELADAT  
KÜLÖNBÖZŐ MEGOLDÁSAINÁL

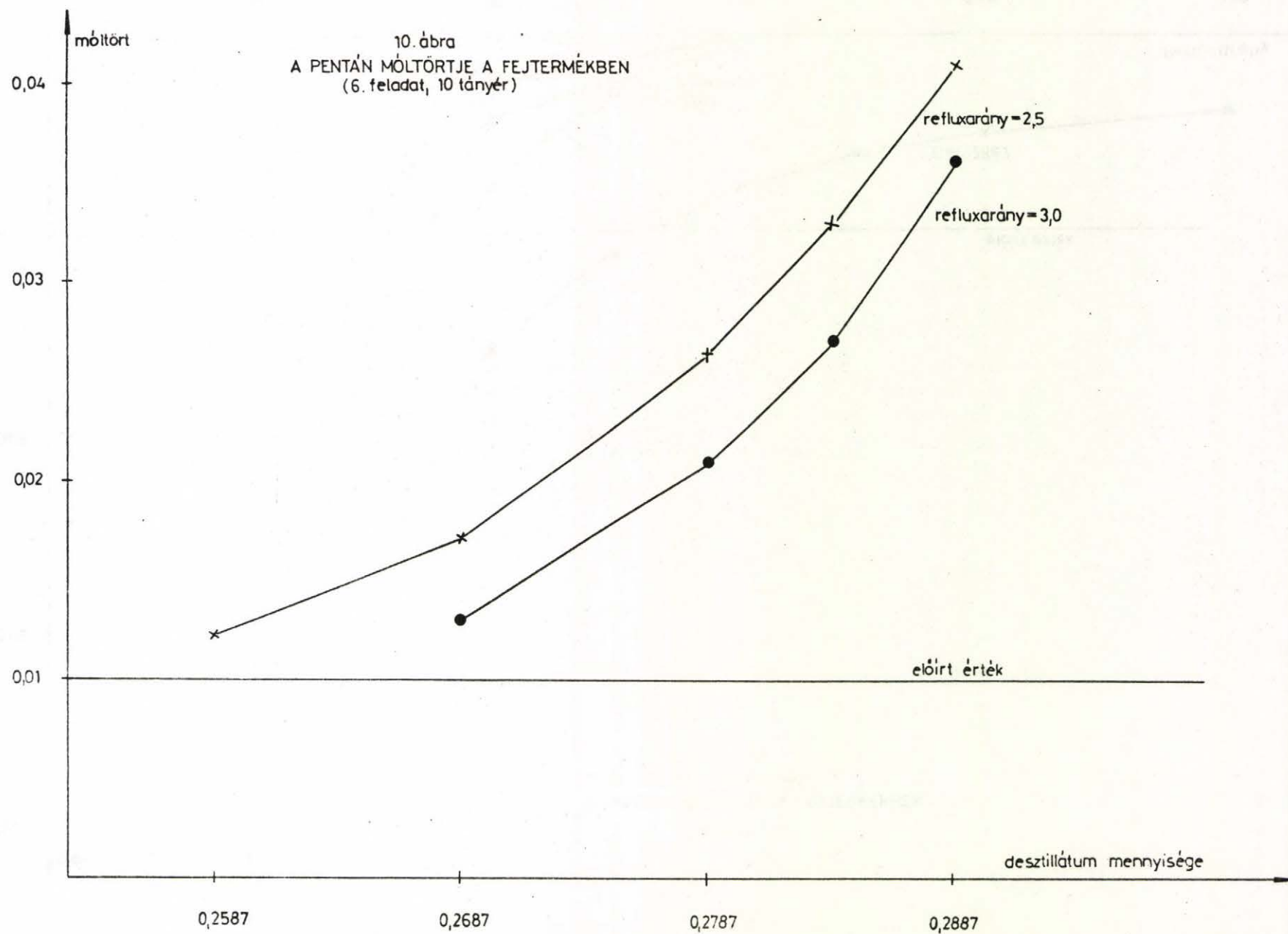




9. ábra  
A PENTÁN MÓLTÖRTJE A FEJTERMÉKBEN  
(6. feladat , 18 tányér)







A TANULMÁNYOK sorozatban eddig megjelentek:

- 1/1973 Pásztor Katalin: Módszerek Boole-függvények minimális vagy nem redundáns,  $\{\wedge, \vee, \neg\}$  vagy  $\{\text{NOR}\}$  vagy  $\{\text{NAND}\}$  bázisbeli, zárójeles vagy zárójel nélküli formuláinak előállítására
- 2/1973 Вашкеви Иштван: Расчленение многосвязных промышленных процессов с помощью вычислительной машины
- 3/1973 Ádám György: A számítógépipar helyzete 1972 második felében
- 4/1973 Bányász Csilla: Identification in the presence of drift
- 5/1973\* Gyürki J.-Laufer J.-Girnt M.-Somló J.: Optimalizáló adaptív szerszámgépirányítási rendszerek
- 6/1973 Szelke Erzsébet-Tóth Károly: Felhasználói Kézikönyv /USER MANUAL/ a Folytonos Rendszerek Szimulációjára készült ANDISIM programnyelvhez
- 7/1973 Legendi Tamás: A CHANGE nyelv/multiprocesszor
- 8/1973 Klafszyk Emil: Geometriai programozás és néhány alkalmazása
- 9/1973 R.Narasimhan: Picture Processing Using Pax
- 10/1973 Dibuz Ágoston-Gáspár János-Várszegi Sándor: MANU-WRAP hátlaphuzalozó, MSI-TESTER integrált áramköröket mérő, TESTOMAT-C logikai hálózatokat vizsgáló berendezések ismertetése
- 11/1973 Matolcsi Tamás: az Optimum számítás egy új módszeréről
- 12/1973 Makroprocesszorok, programozási nyelvek. Cikkgyűjtemény az NJSzT és SzTAKI közös kiadásában. Szerkesztette: Legendi Tamás

---

\*-gal jelölt kivétellel a TANULMÁNYOK megrendelhetők az intézet Könyvtáránál /Budapest, I., Uri u. 49./

MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
KÖNYVTÁRA





646

